

Spacial variability and agro-pedological determinisms of an herbicide fate in the surface horizon - an application to isoproturon in an agricultural catchment of the "Beauce chartraine" region, France

Julien Moeys

▶ To cite this version:

Julien Moeys. Spacial variability and agro-pedological determinisms of an herbicide fate in the surface horizon - an application to isoproturon in an agricultural catchment of the "Beauce chartraine" region, France. Sciences of the Universe [physics]. AgroParisTech, 2007. English. NNT: 2007AGPT0063. pastel-00004448

HAL Id: pastel-00004448 https://pastel.hal.science/pastel-00004448

Submitted on 20 Mar 2009

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers. L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.





THÈSE

pour obtenir le grade de

Docteur de

n°/__/__/__/__/__/__/__/__/

l'Institut des Sciences et Industries du Vivant et de l'Environnement

– AgroParisTech –

Spécialité : sciences du sol

Variabilité spatiale et déterminismes agro-pédologiques du devenir d'un herbicide dans l'horizon de surface



application au cas de l'isoproturon dans un secteur agricole de Beauce chartraine

présentée et soutenue publiquement par

Julien MOEYS

le 20 décembre 2007

devant un jury composé de

- M. Rafael Angulo-Jaramillo C.R. ENTPE
- M. Guy Soulas
- MME Liliane BEL
- M. Dominique **KING**
- M. Ludovic LOISEAU
- M. Yves Coquet

- D.R. INRA
- M.C. AgroParisTech
- D.R. INRA
- Dr. AFSSA
- Examinateur Examinateur

Rapporteur

Rapporteur

Examinateur

Pr. AgroParisTech Directeur de thèse

travail réalisé au sein de l'UMR 1091 INRA / AgroParisTech Environnement et Grandes Cultures, 78850 Thiverval-Grignon



[...] The soil technology era ended when we had to ask and answer questions on the landscape scale. The research questions had to change. Natural variability had to be taken into account, and lack of equilibrium had to be accepted. [...]

J. Moeys

WARKENTIN, 1992, Soil Science For Environmental-Quality - How Do We Know What We Know? *Journal of Environmental Quality* 21, p. 163-166. (*Cité par Baveye et al., 2006*)

[«] L'aire de la technologie du sol s'est achevée quand nous avons eu à définir et résoudre des questions à l'échelle du paysage. Les questions de recherche ont dû évoluer. Il a fallu prendre en compte la variabilité naturelle et accepter l'absence d'équilibre. »

◊ Sommaire abrégé

Partie I Étude bibliographique	24
Partie II Le secteur agricole de Ouarville	71
Partie III Matériels & méthodes	86
Partie IV Résultats	148
Partie V Discussion & conclusions	239
Partie VI Annexes	274

◊ Sommaire général

\diamond	Sommaire Abrégé	3
\diamond	Sommaire général	3
1	AVANT PROPOS & REMERCIEMENTS	13
2	INTRODUCTION, CONTEXTE	16
∎ 2.1	Problématique	16
∎ 2.2	Processus en jeu	17
∎ 2.3	Solutions envisageables	18
2 .4	Programme de recherche ESHEL	19
∎ 2.5	Limites méthodologiques	19
3	OBJECTIFS	21
■ 3.1	Choix méthodologiques initiaux2	21
3.2	Objectifs du travail de thèse	22
■ 3.3	Organisation du mémoire de thèse	23
Part	ie I Étude bibliographique	24
1	LE SOL : CONSTITUANTS & ORGANISATION	25
∎ 1.1	Phase solide, phase liquide et phase gazeuse du sol2	25

■ 1.2	Phase solide du sol : constituants	26
-	Granulométrie des constituants : texture du sol	27
•	Constituants organiques	28
	Complexe argiio-numique	29 30
-	Niveaux d'organisation du sol et structure	30
	Masse volumique apparente	31
•	Variabilité temporelle de la structure	33
■ - 1 2	Phase solide, pedogenese et variabilité spatiale	34 24
■ I.3 -	Organisation du sol en nonzons	34
– 1 <i>/</i>	Agoncomont tridimonsionnal das barizons : la convortur	54
■ 1.4	nádologiquo	с 25
_		35
-	Description des variations latérales du sol	35
■ 1 5	Stratification verticale et latérale de l'horizon travaillé · le	<i>.</i>
	profil cultural	
-	Stratification latérale du profil cultural	36
-	Stratification verticale du profil cultural	36
•	États internes du profil cultural	37
2	LES PROCESSUS DE LIXIVIATION DES PRODUITS	
	PHYTOSANITAIRES DANS LES SOLS	37
■ 2.1	Présentation des processus et de leurs interactions	37
■ 2.2	Processus hydrologiques	40
■ 2.2 ■	Processus hydrologiques	40
■ 2.2 ■	Processus hydrologiques Teneurs en eau massiques et volumiques Teneur en eau et potentiel matriciel	40 40 41
■ 2.2 ■ ■	Processus hydrologiques Teneurs en eau massiques et volumiques Teneur en eau et potentiel matriciel Rétention en eau	40 40 41 42
■ 2.2 ■ ■ □	Processus hydrologiques Teneurs en eau massiques et volumiques Teneur en eau et potentiel matriciel Rétention en eau Modèle de Brooks et Corey (1964) pour $\theta(h)$ Modèle simplifié de Campbell (1974) pour $\theta(h)$.	40 40 41 42 43 43
■ 2.2 ■ ■ □	Processus hydrologiquesTeneurs en eau massiques et volumiquesTeneur en eau et potentiel matricielRétention en eauModèle de Brooks et Corey (1964) pour $\theta(h)$ Modèle simplifié de Campbell (1974) pour $\theta(h)$ Exemples de méthodes de mesure des paramètres	40 40 41 42 43 43 44
■ 2.2 ■ ■ □	Processus hydrologiques Teneurs en eau massiques et volumiques Teneur en eau et potentiel matriciel Rétention en eau Modèle de Brooks et Corey (1964) pour $\theta(h)$ Modèle simplifié de Campbell (1974) pour $\theta(h)$ Exemples de méthodes de mesure des paramètres Ordres de grandeur, variabilité spatiale et déterminismes agro-pédologiques	40 40 41 42 43 43 44 45
■ 2.2 ■ ■ □ □	Processus hydrologiques Teneurs en eau massiques et volumiques Teneur en eau et potentiel matriciel Rétention en eau Modèle de Brooks et Corey (1964) pour $\theta(h)$ Modèle simplifié de Campbell (1974) pour $\theta(h)$ Exemples de méthodes de mesure des paramètres Ordres de grandeur, variabilité spatiale et déterminismes agro-pédologiques L'eau du sol et la plante : notion de réserve utile Elux et conductivité hydraulique en régime non saturé	40 41 42 43 43 43 45 46 47
■ 2.2 ■ □ □ □ □ □ □ □ □ □ □ □ □ □	Processus hydrologiquesTeneurs en eau massiques et volumiquesTeneur en eau et potentiel matricielRétention en eauModèle de Brooks et Corey (1964) pour $\theta(h)$ Modèle simplifié de Campbell (1974) pour $\theta(h)$ Exemples de méthodes de mesure des paramètresOrdres de grandeur, variabilité spatiale et déterminismes agro-pédologiquesL'eau du sol et la plante : notion de réserve utileFlux et conductivité hydraulique en régime non saturéModèle de Brooks et Corey pour $K(h)$	40 40 41 42 43 43 44 45 46 47 48
	Processus hydrologiques Teneurs en eau massiques et volumiques Teneur en eau et potentiel matriciel Rétention en eau Modèle de Brooks et Corey (1964) pour $\theta(h)$ Modèle simplifié de Campbell (1974) pour $\theta(h)$ Exemples de méthodes de mesure des paramètres Ordres de grandeur, variabilité spatiale et déterminismes agro-pédologiques L'eau du sol et la plante : notion de réserve utile Flux et conductivité hydraulique en régime non saturé Modèle de Brooks et Corey pour $K(h)$ Modèle de Campbell (1974) pour $K(h)$	40 40 41 42 43 43 43 44 45 46 47 48 48
	Processus hydrologiques	40 40 41 42 43 43 43 45 46 47 48 48 49 50
	Processus hydrologiques Teneurs en eau massiques et volumiques Teneur en eau et potentiel matriciel Rétention en eau Modèle de Brooks et Corey (1964) pour θ(h) Modèle simplifié de Campbell (1974) pour θ(h) Exemples de méthodes de mesure des paramètres Ordres de grandeur, variabilité spatiale et déterminismes agro-pédologiques L'eau du sol et la plante : notion de réserve utile Flux et conductivité hydraulique en régime non saturé Modèle de Brooks et Corey pour K(h) Modèle de Campbell (1974) pour K(h) Aperçu des méthodes de mesure des paramètres Ordres de grandeur, variabilité spatiale et déterminismes agro-pédologiques L'eau du sol et la plante : notion de réserve utile Flux et conductivité hydraulique en régime non saturé Modèle de Brooks et Corey pour K(h) Modèle de Campbell (1974) pour K(h) Aperçu des méthodes de mesure des paramètres Ordres de grandeur, variabilité spatiale et déterminismes agro-pédologiques La sorptivité	40 40 41 42 43 43 43 44 45 46 47 48 48 49 50 51
 2.2 3 4 4 5 5 6 6 7 	Processus hydrologiques	40 40 41 42 43 43 43 44 45 46 47 48 48 49 50 51 51
■ 2.2 ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■	Processus hydrologiques	40 40 41 42 43 43 43 44 45 46 47 48 48 49 50 51 51
 2.2 3 4 4 5 5 6 7 	Processus hydrologiques	40 40 41 42 43 43 44 45 46 47 48 48 49 50 51 51 53
■ 2.2 ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■ ■	Processus hydrologiques	40 40 41 42 43 43 43 43 44 45 46 47 48 48 49 50 51 51 53 54 55
 2.2 3 2.3 2.4 	Processus hydrologiques Teneurs en eau massiques et volumiques Teneur en eau et potentiel matriciel Rétention en eau Modèle de Brooks et Corey (1964) pour θ(h) Modèle simplifié de Campbell (1974) pour θ(h) Exemples de méthodes de mesure des paramètres. Ordres de grandeur, variabilité spatiale et déterminismes agro-pédologiques L'eau du sol et la plante : notion de réserve utile Flux et conductivité hydraulique en régime non saturé Modèle de Brooks et Corey pour K(h) Modèle de Campbell (1974) pour K(h) Aperçu des méthodes de mesure des paramètres. Ordres de grandeur, variabilité spatiale et déterminismes agro-pédologiques La sorptivité Transport de soluté Équation de convection-dispersion Flux préférentiels Le modèle 'eau mobile / eau immobile' (MIM) Ordres de grandeur, variabilité spatiale et déterminismes agro-pédologiques La sorptivité Transport de soluté Le modèle 'eau mobile / eau immobile' (MIM) Ordres de grandeur, variabilité spatiale et déterminismes agro-pédologiques Processus physiques, chimiques et biolociques subis parametres	40 40 41 42 43 43 43 44 45 46 47 48 48 49 50 51 51 53 54 55 Ar
 2.2 3 2.3 2.4 	Processus hydrologiques	40 40 41 42 43 43 43 43 44 45 46 47 48 48 48 49 50 51 51 51 55 ar 56
 2.2 3 2.3 2.4 	Processus hydrologiques	40 40 41 42 43 43 44 45 46 47 48 46 47 48 49 50 51 51 53 55 ar 56
 2.2 3 2.3 2.4 	Processus hydrologiques	40 40 41 42 43 43 43 43 44 45 46 47 48 48 48 49 50 51 51 51 55 ar 56 56 57
 2.2 3 2.3 2.4 	Processus hydrologiques Teneurs en eau massiques et volumiques Teneur en eau et potentiel matriciel Rétention en eau Modèle de Brooks et Corey (1964) pour θ(h) Modèle simplifié de Campbell (1974) pour θ(h) Exemples de méthodes de mesure des paramètres Ordres de grandeur, variabilité spatiale et déterminismes agro-pédologiques L'eau du sol et la plante : notion de réserve utile Flux et conductivité hydraulique en régime non saturé Modèle de Brooks et Corey pour K(h) Modèle de Campbell (1974) pour K(h) Aperçu des méthodes de mesure des paramètres. Ordres de grandeur, variabilité spatiale et déterminismes agro-pédologiques La sorptivité Transport de soluté Équation de convection-dispersion Flux préférentiels Le modèle 'eau mobile / eau immobile' (MIM) Ordres de grandeur, variabilité spatiale et déterminismes agro-pédologiques Processus physiques, chimiques et biologiques subis pa les produits phytosanitaires L'adsorption de solutés organiques par la phase solide du sol Représentation par le modèle le Freundlich. Normalisation de l'adsorniton par le carbone organique	40 40 41 42 43 43 44 45 46 47 48 46 47 48 49 50 51 51 55 ar 56 57 57 57

	Dégradation des pesticides dans le sol Représentation par une cinétique exponentielle d'ordre 1 Représentation par une cinétique bi-exponentielle Aperçu des méthodes de mesure des cinétiques de dégradation§	. 60 .60 .61 .62
3	L'ISOPROTURON	62
■ 3.1	Structure chimique de l'isoproturon et de ses métabolites	63
3.2	Propriétés physico-chimiques	64
3.3	Homologations des usages	64
3 .4	Évaluation de son comportement dans les sols	65
	Informations fournies par les bases de données et les ouvrages de référence	. 65
	Adsorption (K_{OC}) Dégradation : DT_{50} au laboratoire Adsorption et vitesse de dégradation : variabilité et déterminismes rapportés par la littérature scientifique	.03 .66 .66
	Adsorption (K_{OC})	.66
■ 3.5	Occurrences de l'isoproturon dans les eaux de surface e souterraines.	.08 t 69
Part	ie II Le secteur agricole de Ouarville	71
1	LOCALISATION GÉOGRAPHIQUE	72
∎ 1.1	Localisation	72
■ 1.2	Extension	72
■ 1.3	Géographie	73
2	DONNÉES MÉTÉOROLOGIQUES	75
•	Type de climat	. 75
:	Températures moyennes Précipitations moyennes, répartition mensuelle Évènements exceptionnels : précipitations	.75 .76 .77
3	ACTIVITÉS AGRICOLES	78
4	C ONTEXTE GÉOLOGIQUE	78
4 .1	Géologie et hydrogéologie de la Beauce	78
•	Le calcaire de Beauce	. 78
■ ■ <i>4</i> 2	La nappe de Beauce	.78 70
■ 7 .2		01
5		ΟΙ
∎ 5.1	indépendant	9 81
∎ 5.2	Horizons caractéristiques des types pédologiques de la carte	84
Part	ie III Matériels & méthodes	.86

1	DÉMARCHE GÉNÉRALE	87
2	PLAN D'ÉCHANTILLONNAGE	87
∎ 2.1	Nombre d'échantillons	87
∎ 2.2	Stratification verticale	88
■ 2.3	Éléments utilisés pour la stratification	89
•	Principe	. 89
	Adaptation aux conditions de terrain	.90 .90
■ 2.4	Localisation géographique des sites – recherche des	
	sites visés	91
■ 2.5	Échantillonnage du sol : protocole	91
■ 2.6	Résultats : stratification obtenue	92
:	Période et condition de prélèvement État du sol et culture en place au moment du prélèvement	. 92
	Localisation géographique des sites prélevés	. 94
	Stratification par rapport au type pédologique indiqué par la carte de sol	. 95
	Stratification par rapport à la géologie	.95 .95
-	Nombre d'exploitants agricoles concernés par les prélèvements	. 95
3	LE SOL : CONSTITUANTS ET ORGANISATION	96
■ 3.1	Propriétés physico-chimiques des sols	96
	Analyses physiques et physico-chimiques Masse volumique apparente au cylindre	.96 97
	Principe général de la mesure	.97
□ ■ 3 2	Protocole de mesure	.97 Q7
■ J.Z		91 00
4	LES PROPRIETES HYDRAULIQUES	99
■ 4.1	Détermination des paramètres de la rétention en eau sur	00
_	Principe	99
	Détermination de la teneur en eau à un potentiel donné avec une presse de	. , ,
П	Richard Protocole de mesure	.99 100
■ 4.2	Détermination des paramètres de la conductivité	1100
	hydraulique <i>in situ</i>	100
	Principe	. 100
•	un infiltromètre à disque	. 100
	Détermination de la teneur en eau volumique initiale et finale	.103
	La solution analytique de Wooding (1968), base théorique de l'infiltrométrie	.103
	Calcul de S et K par la méthode de White et Sully (1987) Calcul de S et K par la méthode de Haverkamp et al. (1994)	.106 .109
	Modifications du calcul de S par la méthode de White et Sully (1987)	.111
	<i>Équation de Haverkamp et al. (1994) pour le régime permanent</i>	.115 .115
	Calcul de S et K par ajustement direct sur le régime transitoire et/ou le régime	

П	permanent Comparaison avec les mesures à la parcelle (Millot, 2004)	.115 .119
4 .3	Fraction d'eau immobile	120
-	Principe Protocole	. 120 . 121
5	PRÉPARATION DES ÉCHANTILLONS DE SOL AVANT	
	LES MESURES AVEC L'ISOPROTURON	122
■ 5.1	Tamisage et détermination de la teneur en eau au prélèvement	122
■ 5.2	Détermination de la teneur en eau à pF 2 après tamisage	122
6	ADSORPTION DE L'ISOPROTURON	123
■ 6.1	Adsorption linéaire de l'isoproturon sur les sols	123
•	Principe	. 123
■ ■ 6 2	Protocole K ₂ des horizons de surface et profonds de la parcelle	. 124
■ 0.2	d'étude	125
7	DÉGRADATION DE L'ISOPROTURON	126
∎ 7.1	Suivi de la dégradation et de la minéralisation sur des	
	incubations au laboratoire	126
	Principe Protocole général	126
•	Cinétique de dégradation et de minéralisation	. 131
∎ 7.2	Estimation des demi-vies de dégradation et de	101
_	MINERAIISATION	1 3 1 132
	Fixer ou ajuster la concentration initiale	.132
•	Ajustement direct, non lineaire	. 133
0	METHODES STATISTIQUES UTILISEES POUR LA CADACTÉDISATION DE LA VADIADILITÉ SDATIALE DES	
		133
■ 8 1	Hiérarchie des propriétés	134
■ 8.2	Statistiques descriptives	135
_ 0	Graphiques 'box & whisker'	. 135
	Statistiques de distribution Skewness & Kurtosis	. 136 . <i>13</i> 6
■ 8.3	Statistiques sur des propriétés non-normales	137
•	Cas des populations bi- ou plurimodales	138
•	Cas des propriétés intrinsèquement non-normales Tests statistiques non paramétriques	. 138
■ 8.4	Corrélations entre propriétés quantitatives	139
∎ 8.5	Étude des liens entre propriétés qualitatives et propriétés	5

	quantitatives par analyse de la variance	140
8 6	Étude de la variabilité par Analyse en Composantes	
- 0.0	Principales	141
07		
∎ 8.7	Prediction des proprietes à l'aide de classes ou de	
	fonctions de pédotransfert locales	142
•	Classes de pédotransfert locales	143
	Fonctions de pédotransfert locales	143
	Approche par regression multivariée : PLSR Approche par régression multivariée : GIFI-PLSR	
		4.40
Part	ie IV Resultats	148
1	CONSTITUANTS ET ORGANISATION DES SOLS	149
■ 1.1	Propriétés physiques et physico-chimiques des sols	149
•	Analyses physiques et physico-chimiques	149
	Granulométries fine et grossière	
	Carbone, azote organique et rapport C sur N	
	pH 153	
	Masse volumique apparente au cylindre	154
■ 1.2	Description des sondages tarière	154
•	Matériaux parentaux et substrats	154
	Matériaux et successions identifiés	
	Profondeur d'apparition du substrat	150 157
-	Types de sol identifiés	157
	Modalité de travail du sol (conventionnel – simplifié)	159
	Répartition spatiale des sols et de ses propriétés physico-chimiques	159
■ 1.3	Synthèse, discussion et conclusion intermédiaire	161
2	PROPRIÉTÉS HYDRIQUES DU SOL	162
■ 2.1	Rétention en eau	162
	Relation potentiel matriciel – teneur en eau	163
•	Paramètres de la fonction de rétention de Campbell	164
■ 2.2	Conductivité hydraulique	165
•	Estimation de la conductivité au voisinage de la saturation : infiltrométrie	
	monopotentiel	165
	Calculs par la méthode de White et Sully (1987)	
	Paramètres de la fonction de conductivité hydraulique de Campbell	
2 3	Fraction d'eau immobile	183
= 2.0	Précision des mesures et respect des hypothèses	183
-	Valeurs de fraction d'eau immobile	185
■ 2.4	Synthèse, discussion et conclusion intermédiaire	185
3	COMPORTEMENT DE L'ISOPROTURON DANS LES	-
~	SOLS	188
_ 2 4	Advantion de l'iconnetures dess les sols	100
∎ 3.1		100
	Coefficient d'adsorption linéaire	188

	Coefficient d'adsorption normalisé par le carbone organique K_D des horizons de surface et profonds de la parcelle d'étude <i>Horizons de surface de la parcelle</i>	189 189 . <i>18</i> 9
	Horizons profonds de la parcelle	. 190
∎ 3.2	Degradation de l'isoproturon	191
-	Calcul par régression linéaire	191
	Influence de la concentration initiale : calculee ou imposee /	. <i>191</i> 10/
	Influence de l'algorithme d'optimisation et de la fonction d'erreur à minimiser pour	1)4
	l'optimisation	.194
	Choix d'une des méthodes testées	197
	Analyse a posteriori des fonctions d'erreur	.197 198
	Choix d'une méthode	. 199
•	Demi-vie de minéralisation de l'isoproturon	200
3.3	Synthèse, discussion et conclusion intermédiaire	200
4	ÉTUDE STATISTIQUE DE LA VARIABILITÉ SPATIALE ET	
	DES DÉTERMINISMES AGRO-PÉDOLOGIQUES	202
■ 4.1	Transformer les propriétés non-normales ?	203
4 .2	Corrélations entre propriétés caractéristiques du	
	système pédologique	203
	Cohérence du système pédologique	203
	Propriétés liées aux pratiques agronomiques	205
	Propriétés de rétention en eau du sol	205
	Corrélations des propriétés entre elles	.205 206
	Propriétés hydrodynamiques	206
	Fraction d'eau immobile (pour $h = -1$ cm)	207
•	Adsorption de l'isoproturon sur les sols : K _D & K _{OC}	208
	Dégradation et minéralisation de l'isoproturon dans les sols (DT_{50})	208
■ 4.3	Approche graphique des covariations avec la texture de surface	209
4 4		200
■ 4.4	importance des proprietes agro-pedologiques	040
	qualitatives : analyses de la variance	210
•	Analyses de la variance à un facteur contrôlé	211
	Seullage de proprietes quantitatives Fffets des propriétés aeronomiques et pédologiques qualitatives sur la masse volumique	,211
	apparente et la teneur en matière organique du sol	.211
	Effets des propriétés agronomiques et pédologiques qualitatives sur les propriétés	
_	hydriques du sol et sur les interactions sol-isoproturon	.214
_ <i>1</i> ⊑	Étude de la variabilité par Apolyce en Composentes	217
∎ 4.5	Elude de la variabilite par Analyse en Composantes	040
	Principales	219
	Abréviations des noms de propriétés	220
	v anabilité des proprietes physico-chimiques & de rétention en eau des	220
-	Variabilité des propriétés physico-chimiques et de la fraction d'eau immobile	223
-	Variabilité des propriétés physico-chimiques et de la conductivité hydraulique	
	$(K_{-1cm} \text{ et } K_{S})$	224
	Conductivite nyaraanique a saturation (KS)	. 444

	Conductivité hydraulique à – 1 cm (K _{-1 cm})	225
•	Variabilité des propriétés physico-chimiques et de l'adsorption de l'isoproturon	226
	Coefficient d'adsorption linéaire (K_D)	226
	Variabilité des propriétés physico-chimiques de la dégradation et de la	220
-	minéralisation de l'isoproturon	229
4 6	Prédiction des propriétés à l'aide de classes ou de	
	fonctions de pédotransfert locales : faisabilité	230
-	Classes de pédotransfert locales	230
	Classes de pédotransfert pour le K_s ou $K_{.1 cm}$	231
	Classes de pédotransfert pour le K _{OC}	231
	Classes de pédotransfert pour la DT_{50} de l'isoproturon	232
	Classes de pedotransfert pour à autres proprietes Conclusions sur les classes de pédotransfert	232
	Fonctions de pédotransfert locales	233
	Approche par régression multivariée : PLSR	233
	Approche par régression multivariée : GIFI-PLSR	237
■ 4.7	Synthèse, discussion et conclusion intermédiaire	237
Part	ie V Discussion & conclusions	239
		200
1	DISCUSSION	240
■ 1.1	Identification des problèmes rencontrés	240
■ 1.2	Répercussions des problèmes rencontrés	243
2	CONCLUSION GÉNÉRALE	244
\diamond	RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES	248
\diamond		261
∨		201
\vee	LISTE DES TABLEAUX	203
\diamond	LISTE DES ÉQUATIONS	270
Part	ie VI Annexes	274
1	TERMINOLOGIE	275
∎ 1.1	Termes de pédologie	275
1.2	Termes spécifiques à l'étude	276
■ 1.3	Termes relatifs à l'échantillonnage	276
1 .4	Termes relatifs aux modèles	277
■ 1.5	Termes relatifs aux tests statistiques	279
■ 1.6	Termes de programmation	279
2	STRATIFICATION DE L'ÉCHANTILLONNAGE :	
	OBJECTIFS	280
∎ 2.1	Type de sol	280

2.2	Classe de profondeur	280
2.3	Formation géologique	280
2 .4	Classe de clarté sur une image satellite	281
■ 2.5	Distance entre les sites	281
■ 2.6	Pondération des différents critères	281
3	PROTOCOLES DE MESURE	282
■ 3.1	Masse volumique apparente au cylindre	282
■ 3.2	Mesure de la relation $\theta(h)$ – Presses de Richards	284
	Prélèvement de cylindres de sol non perturbés	. 284
	Mesure de la teneur en eau à un potentiel imposé	. 285
•	Séchage à 105°C et mesure du poids sec	. 285
4	PRECISIONS SUR L'ORGANISATION ET LA GESTION	<u> </u>
	DES DONNEES	286
■ 4.1	Stockage et organisation des données	286
	Base de données des mesures Base de données des sondages tarière	. 286 . 286
4 .2	Traitement des données	287
5	QUALITÉ DES AJUSTEMENTS : LES FONCTIONS	
	D'ERREUR	288
■ 5.1	Racine carrée de l'erreur quadratique moyenne	288
5 .2	Racine carrée de l'erreur relative au carré	289
	Erreur relative à l'importance de la variable	. 289
5 3	Pourcentage d'erreur moven en valeur absolue	. 289 290
5 .4	Estimation des erreurs par validation croisée	290
	Estimation de l'erreur avec les données de calibration du modèle ou avec des	
-	données indépendantes	. 290 290
6	TRANSFORMATIONS DE VARIABIES : QUELQUES	. 220
•	EXEMPLES	291
■ 6.1	Centrage et réduction d'une variable	291
■ 6.2	Transformation inverse négative	292
■ 6.3	Transformation logarithmique	292
7	CHOIX DU NOMBRE DE COMPOSANTES ET DE	
•	VARIABLES POUR LA PLSR	292
	Méthode de sélection du nombre de composantes	. 292
	Méthode de sélection du nombre de composantes Méthodes de sélection des variables prédictives	. 292 . 293 . 293
	Méthode de sélection du nombre de composantes Méthodes de sélection des variables prédictives Méthode de sélection 'backward' Méthode de sélection 'forward'	. 292 . 293 . 293 . 293 . 294

	<i>Cas de résultats divergents entre les méthodes backward et forward</i> Constitution de sous-ensembles de variables prédictives à tester dans les	.295
	analyses par PLSR	. 296
8	HISTOIRE GÉOLOGIQUE ET PÉDOLOGIQUE DU SITE DE	
	OUARVILLE : SYNTHÈSE ET HYPOTHÈSES	298
∎ 8.1	Histoire géologique pré-glaciaire	298
∎ 8.2	Histoire géologique glaciaire	299
∎ 8.3	Pédogenèse récente et facteurs anthropiques	299
	Pédogenèse	. 299
۔	TYPOLOGIE DES VAPIABLES DES MODÈLES DE	. 300
5		200
	TRANSFERT	302
10	TRANSFERT	302
10	FICHE DES SONDAGES TARIÈRE	302
10 11	FICHE DES SONDAGES TARIÈRE CARTES DES PROPRIÉTÉS QUANTITATIVES	302
10 11	TRANSFERT FICHE DES SONDAGES TARIÈRE CARTES DES PROPRIÉTÉS QUANTITATIVES MESURÉES	302 303 304
10 11 ■ 11.1	FICHE DES SONDAGES TARIÈRE CARTES DES PROPRIÉTÉS QUANTITATIVES MESURÉES Propriétés pédologiques et physico-chimiques	302 303 304 304
10 11 ■ 11.1 ■ 11.2	FICHE DES SONDAGES TARIÈRE CARTES DES PROPRIÉTÉS QUANTITATIVES MESURÉES Propriétés pédologiques et physico-chimiques Propriétés hydrologiques	302 303 304 304 305
10 11 ■ 11.1 ■ 11.2 ■ 11.3	FICHE DES SONDAGES TARIÈRE CARTES DES PROPRIÉTÉS QUANTITATIVES MESURÉES Propriétés pédologiques et physico-chimiques Propriétés hydrologiques Carbone organique et propriétés d'adsorption et de	302 303 304 304 305
10 11 ■ 11.1 ■ 11.2 ■ 11.3	FICHE DES SONDAGES TARIÈRE CARTES DES PROPRIÉTÉS QUANTITATIVES MESURÉES Propriétés pédologiques et physico-chimiques Propriétés hydrologiques Carbone organique et propriétés d'adsorption et de dégradation de l'isoproturon	302 303 304 304 305 306
10 11 ■ 11.1 ■ 11.2 ■ 11.3	FICHE DES SONDAGES TARIÈRE CARTES DES PROPRIÉTÉS QUANTITATIVES MESURÉES Propriétés pédologiques et physico-chimiques Propriétés hydrologiques Carbone organique et propriétés d'adsorption et de dégradation de l'isoproturon ABSTRACT	302 303 304 304 305 306 307

1 Avant propos & remerciements

À André Moeys, mon grand-père.

À celles et ceux qui aiment éduquer et enseigner, ... même aux enfants distraits et un peu paresseux

merci

____000000 _____

(Toc... ... Toc... ... Toc... ...)

Maigre espace de liberté dans le cadre de l'exercice très codifié que constitue la rédaction d'un manuscrit de thèse, l'écriture des remerciements est un exercice de style destiné à lui donner un parfum plus inhumain. La thèse est une longue pièce de théâtre qui, partant d'une banale tranche de vie, oscille parfois entre tragédie, comédie et farce absurde. Seuls les interprètes peuvent démêler vérité et légende dans le « synopsis » officieux et humoristique que constitue l'avant propos...

Des trois actes de la thèse (mise en place de l'intrigue – perte de contrôle et basculement – épilogue), je commencerai comme le veut la tradition par la chute-fin, puisque celle-ci n'est normalement que le début d'une autre pièce, que l'on souhaite plus longue, mais tout aussi riche en rebondissements.

C'est donc avec un grand plaisir que j'adresse mes sincères remerciements à **Yves COQUET** (Pr. AgroParisTech, Grignon), mon directeur de thèse, qui fût tout à la fois co-scénariste et, jusqu'au bout, un discret mais efficace metteur en scène. J'ose ici évoquer ce surnom qui n'est pas volé, « la flèche », tant Yves a toujours cerné mes questions les plus ardues avec une rapidité et une pertinence déconcertantes, tel un « deus ex machina » qui aurait anticipé les questions et les doutes que ne manque pas d'avoir son doctorant ! J'ai aussi beaucoup apprécié la patience avec laquelle Yves a tenté d'éclaircir éclairci les subtilités de l'hydrologie du sol que j'avais parfois du mal à comprendre.

A la fois critiques et spectateurs résignés privilégiés, le jury de soutenance de thèse mérite lui aussi une mention spéciale.

Je remercie chaleureusement le président du jury, **Dominique KING** (D.R. INRA, Orléans), qui a eu la délicate mission d'accorder les différentes voix présentes dans le jury, chacune représentant une discipline distincte de l'univers hétéroclite qu'est la science du sol. L'expérience d'un spécialiste reconnu de l'« approche spatiale de la couverture pédologique », domaine ô combien pluridisciplinaire, ne pouvait mieux convenir à ce rôle, et a permis de mettre en perspective efficacement l'ensemble du travail.

Je remercie également, et avec beaucoup d'admiration, les deux rapporteurs de cette thèse, **Rafael** ANGULO-JARAMILLO (C.R., ENTPE, Lyon) et Guy SOULAS (D.R. INRA, Bordeaux). Ils ont eu la

délicate mission de lire avec attention ce pavé-manuscrit, chacun avec un regard différent : hydrologie des sols pour le premier, et comportement des pesticides dans le sol pour le second. Je reconnais volontiers que le scénario, quoique passionnant, traîne parfois en longueur. Mais loin de s'y enliser, les rapporteurs ont su repérer les aspects les plus critiquables critiques de ce travail, et apporter ainsi à la soutenance le recul si difficile à prendre en fin de thèse.

Je ne saurais trop remercier Liliane BEL (M.C., AgroParisTech, Paris), qui a accepté de s'écarter un peu de son domaine de recherche habituel et d'apporter une voix plus « statistique » à ce jury. Tel un pasteur-missionnaire à la recherche de ses brebis égarées, le statisticien qui s'attaque à aborde la science du sol sait qu'il lui faudra souvent faire preuve de patience et de pédagogie, tant les a priori ésotériques-sont nombreux. Si elles n'étaient pas toujours indispensables aux pionniers qui ont fondé la pédologie, les statistiques sont désormais un ingrédient essentiel au progrès de la science des sols.

Enfin, j'ai également beaucoup apprécié que **Ludovic LOISEAU** (Dr., AFSSA) participe à ce jury. Après la mise en orbite du candidat au doctorat par les questions pointilleuses pointues du jury, il est délicat de le ramener vers des questions plus pragmatiques sans risquer un atterrissage d'urgence. Ça n'en est pas moins indispensable, tant les questions soulevées par la problématique « sol-eau-pesticide » sont importantes pour notre société.

Mais n'oublions pas qu'avant le jury de soutenance de thèse, et en parallèle du directeur de thèse, intervient un groupe plus discret, mais dont le rôle est non moins essentiel à toutes les étapes de la thèse et d'une pièce, le **comité de sages pilotage**.

Je remercie donc tout spécialement Hocine BOURENNANE (INRA, Orléans), Isabelle COUSIN (INRA, Orléans), Igor DUBUS (BRGM, Orléans), Jean-Marc GILLIOT (AgroParisTech, Grignon), Christian GUYOT (Bayer CropScience) et Emmanuelle VAUDOUR-DUPUIS (AgroParisTech, Grignon) pour s'être penché à deux reprises sur ce travail. Les membres du comité de pilotage jouent successivement le rôle de pyromanes et de pompiers : ils doivent dans un premier temps éclairer le doctorant sur les nombreuses pistes qui s'offrent à lui, et les chausse trapes dans lesquelles il ne doit pas tomber ; puis, dans un second temps, l'aider à rassembler et à valoriser ses trouvailles, et à sortir des chausse trapes dans lesquelles il n'a pas manqué de tomber.

Mais revenons à notre pièce de théâtre. Celle-ci doit comme chacun sait répondre à 3 contraintes : unité de temps (3 ans, voir plus si affinités), unité de lieu (si possible un endroit isolé, propice au huis clos) et unité d'action (la thèse, encore la thèse, et rien que la thèse).

Passons rapidement sur l'unité de temps, qui a été à peu près-respectée. L'unité de lieu a pleinement bénéficié de la situation exceptionnelle de **Thiverval-Grignon**, écrin de verdure isolé au milieu du « Far West » parisien. Ce décor a servi à merveille la pièce, tout en autorisant de sains et reposants « entractes ». L'unité de recherche « Environnement et Grandes Cultures » (INRA, AgroParisTech) a vu se dérouler l'essentiel de l'action. Je remercie au passage ses directeurs d'unité successifs, **Pierre CELLIER** et **Enrique BARRIUSO**, ainsi que **Sabine HOUOT**, responsable de l'équipe Sol, pour leur accueil et pour leur capacité d'écoute très appréciable. La page de Grignon sera assurément difficile à tourner. Il faut aussi souligner la diligence et le pragmatisme très appréciable des 'promoteurs', l'École **Doctorale ABIES**, qui contribue indéniablement au bon déroulement des thèses (et plus encore de l'après-thèse).

Le secteur de **Ouarville**, en Beauce, est l' « objet » principal des travaux présentés ici. L'étude aurait certainement bénéficié d'une présence plus assidue sur le « terrain », mais il est vrai que chaque heure passée in situ implique de longues heures d'un cnnuyeux-patient travail de laboratoire, puis de traitement des données... Ainsi va la recherche. Je n'oublie pas de remercier très sincèrement les **exploitants agricoles de Ouarville et de ses environs**, qui ont accepté sans sourcilier que nous fassions des prélèvements et des mesures sur leur parcelle, malgré le caractère « médiatiquement sensible » du sujet étudié. Merci aussi a **Sébastien SALÉ** (Chambre d'Agriculture d'Eure-et-Loir) qui a toujours répondu avec beaucoup d'enthousiasme à mes questions « agronomiques », malgré certains atermoiements du programme sur ce point.

En coulisse de la pièce se tiennent de proches collaborateurs, dont le rôle parfois plus discret cache en fait une contribution importante au numéro d'équilibriste du doctorant :

Un grand merci à Christophe LABAT (terrain & labo de physique), Valérie BERGHEAUD et Pierre BENOÎT (labo pesticides), et Nathalie BERNET-LEMPEREUR (labo de chimie).

J'attribue un prix spécial à l'ensemble de l'équipe Sol pour l'état d'esprit professionnel, agréable et détendu durant les pauses café-le travail.

L'unité d'action est plus délicate. Elle doit être de préférence servie par des interprètes au caractère ouvert, affirmé et original (appelés « chercheurs »). Comme dans les meilleures épopées, l'interprète principal doit tenir son rôle tandis que se déroulent autour de lui des drames parallèles, mais pas toujours synchrones. Il côtoie ainsi d'autres acteurs secondaires dits « doctorants », qui sont autant de miroirs narcissiques sur son état présent (doctorant en régime de croisière), son passé récent (insouciance heureuse du doctorant qui joue le prologue de sa thèse), ou son futur immédiat (état de décomposition avancée du doctorant en phase terminale de rédaction).

Les doctorants « synchrones » sont bien entendu les principaux complices, pour le meilleur comme pour le pire... J'envoie donc une mention toute personnelle à deux piliers sans qui rien n'aurait été possible (enfin, presque rien) : **Lionel ALLETTO** et **Xavier TROLLE**. Cher Lionel, il est bien difficile de travailler à ta suite sur un sujet, tant en matière de boulot tu n'as rien à envier à Stakhanov ou Hercule (enfin, on sait qu'Hercule était une légende, et Stakhanov un outil de propagande !). Mais tant qu'à choisir entre plier sous le travail et se plier de rire, j'accepte sans rancune bien volontiers ton invitation à prolonger nos discussions autour d'une bonne bière (ou d'un bon vin d'chez toi) ! Quant à Xavier, tu sais que ces « remerciements » ne sont qu'une vile façade pour cacher mes prudes talents d'actrice acteur, mais tu ne me feras pas chanter sur ce point (salut au passage à toute l'équipe des Agricompteurs !). Là aussi, je prolongerai bien volontiers nos interminables discussions métaphysiques, élément indispensable à la bonne santé psychologique du doctorant...

Les voisins de bureau et autres intermittents de la recherche sont eux aussi exposés aux aléas du huis clos (parfois trop clos). Merci à ceux qui ont subit-égayé mon passage à Grignon : (dans l'ordre alphabétique) Marie ALEXIS, Maha CHALHOUB, Bruno CHEVIRON, Diego COSENTINO, Elsa COUCHENEY, Lionel BERTHIER, Magalie DELMAS, Jeremy DOUBLET, Nadia ELYEZNASNI, Muriel JOLY, Théodore KABORE, HongJian GAO, Gwenaëlle LASHERMES, Thomas LERCH, Mercedes MENDEZ, Christophe MONI, Jean-Christophe PITRES, Clément PELTRES, GuyFang QI (et bien d'autres que j'ai volontairement certainement oublié !)...

Mais comment oublier l'élément sans lequel une pièce-thèse ne serait rien : le publie-les amis, et **la** famille !

Je ne saurais faire ici la liste de tous **les voisins** de la résidence Jacques Ratineau (aka la fine équipe de « **move'n'Grignon** »), avec qui j'ai eu le plaisir de partager chaque soir (ou presque) mes repas, et bien d'autres bon moments. Merci à tous infiniment, et au plaisir de vous retrouver pour un « mercredi sans spaghetti » ou autour d'un bon feu et une bonne grillade au « bassin des anglais » (c'est interdit ? vous en êtes sur ?). Merci aussi à mon ami **Benoît MERLOT** (aka « DJ Ben ») qui, tout comme Xavier, a en plus eu la charge de se farcir relire avec un regard « neuf » la première partie de ce document !

A ma famille, mes parents Benoît et Christine, ma sœur Marie et mon frère Charles, merci infiniment pour votre soutien (pour cette thèse, et pour <u>tout</u> ce qui a précédé !), quand bien vous fûtes fort négligés du fait de mes activités scientifiques de plus en plus passionnantes...

A tous, bon vent, et au plaisir !

(Rideau)

2 Introduction, contexte

■ 2.1 Problématique

Les produits phytosanitaires de protection des cultures – plus communément appelés pesticides – sont un des piliers de la production végétale d'une agriculture intensive (certains diront 'productiviste').

Les plantes cultivées ont généralement été sélectionnées pour leur capacité à produire des **rendements élevés** quand elles sont semées dans un sol qui leur fournit en suffisance l'eau, l'azote et les autres éléments nutritifs qui sont nécessaires à leur croissance. La **fertilisation adéquate** du sol par l'agriculteur (fertilisation 'raisonnée') permet de subvenir aux exigences des plantes cultivées. Seulement, la sélection variétale est souvent accompagnée d'un corollaire indésirable : la plante est généralement moins résistante aux maladies¹, elle se défend moins bien contre les ravageurs² et elle est moins apte à concurrencer les plantes adventices qui s'accaparent les ressources en eau, éléments minéraux et lumière.

Les variétés à haute performance ne nécessitent donc pas seulement une fertilisation optimale, elles ont aussi besoin d'être protégées par des traitements pesticides adéquats : herbicides, fongicides, insecticides et autres produits phytosanitaires sont indispensables à leur croissance.

Une partie du produit phytosanitaire apporté lors du traitement n'atteint jamais sa cible. Une part importante du produit résiduel est dégradée par les micro-organismes du sol, par la lumière ou par d'autres phénomènes physiques et/ou chimiques. Une faible proportion peut aussi échapper à cette dégradation, et être emportée dans l'air, ou avec l'eau qui circule dans le sol. Cette dernière fraction se retrouve par la suite dans les milieux aquatiques de surface ou les nappes phréatiques.

Les produits phytosanitaires étant souvent coûteux, ces pertes ont un coût économique pour l'agriculteur (l'efficacité du traitement est réduite). Plus grave, la faible fraction du produit qui s'échappe parfois vers l'air ou les ressources en eau peut ensuite être inhalée/ingérée par des organismes vivants (plantes et animaux) et aussi par l'homme.

Les produits phytosanitaires étant des molécules chimiquement réactives, il arrive qu'elles aient un effet toxique (immédiat ou chronique) sur certains organismes vivants non-ciblés quand elles sont ingérées en quantité trop importante. D'un problème agro-économique, les pertes de produits phytosanitaires deviennent un problème environnemental, voire un problème de santé publique.

Face à ce problème, plusieurs solutions sont envisageables, mais avant de les exposer, il est important de rappeler les processus biologiques, physiques et chimiques qui aboutissent à ces pertes inopinées de produits phytosanitaires.

L'étude présentée ici est focalisée sur la pollution diffuse des ressources en eau souterraines par les produits phytosanitaires, et plus particulièrement sur l'initiation de ces transferts dans la couche la plus superficielle de la croûte terrestre, le sol.

¹ Attaques fongiques ou virales.

² Insectes, gastéropodes et rongeurs.

■ 2.2 Processus en jeu

A l'origine des transferts de produits phytosanitaires vers les ressources en eau se trouvent plusieurs **phénomènes majeurs de transport des molécules par l'eau** :

- (i) le ruissellement de l'eau à la surface des champs cultivés³, qui peut emporter les molécules vers les cours d'eau et les milieux aquatiques terrestres et maritimes ;
- (ii) la **percolation** (le drainage) de l'eau à travers le sol, qui peut emporter les molécules vers les nappes phréatiques, les nappes alluviales ou les nappes perchées;
- (iii) l'entraînement de particules organo-minérales par les phénomènes d'érosion (lors du ruissellement) ou de transport de colloïdes (lors de la percolation) peut contribuer au transport de molécules phytosanitaires si ces dernières sont adsorbées sur les particules.

Les conséquences de ces phénomènes de transport sont atténuées – ou parfois accentuées – par des **processus spécifiques aux sols** :

- (a) Processus physiques, avec les caractéristiques complexes des flux d'eau en surface et dans le sol. Ces caractéristiques déterminent le mouvement des solutés (molécules en solution) dans la porosité du sol relativement aux flux d'eau : convection, dispersion, piégeage par diffusion, flux préférentiels, etc. Ces caractéristiques déterminent la quantité d'eau qui percole à travers le sol et sa vitesse.
- (b) Processus chimiques, avec l'adsorption des molécules sur la phase solide du sol. Cette adsorption temporise le transport des molécules par l'eau du sol, qui pourront alternativement être 'immobilisée' sur la phase solide du sol ou 'mobilisées' depuis cette dernière. L'adsorption est aussi à l'origine du transport de molécules sur les particules de sol lors des phénomènes d'érosion. Certaines molécules voient aussi leur forme évoluer en fonction des conditions de pH et de potentiel rédox (Eh) du sol.
- (c) Processus biologiques, avec la dégradation des molécules par les micro-organismes du sol (mais aussi parfois par des phénomènes chimiques ou physico-chimiques comme l'hydrolyse ou la photolyse). Plus cette dégradation est lente, plus les risques de transferts de molécules vers les nappes sont élevés (si la molécule est mobilisable).
- (d) Les molécules phytosanitaires, ou de leurs dérivés, peuvent aussi subir des phénomènes d'immobilisation sous forme de 'résidus liés' dans la phase solide du sol, par des processus physiques, chimiques ou biologiques encore mal connus. Ces derniers peuvent être à l'origine d'une dynamique de stockage et de relargage de molécules sur des temps plus longs que les phénomènes et processus exposés ci-dessus.

L'ensemble de ces phénomènes est modulé en fonction des variations climatiques quotidiennes et saisonnières (évaporation, pluviométrie, température), des opérations culturales (labour, semis...) et de la croissance des plantes cultivées (transpiration).

³ Ou de toute autre surface ayant reçu un traitement par un produit phytosanitaire : bords de routes, voies ferrées, allées engravées, pelouses de particuliers ou de terrains de sport...

2.3 Solutions envisageables

Il existe un large éventail de solutions qui pourraient potentiellement aider à résoudre les problèmes de pollution des ressources en eau par les produits phytosanitaires :

- (1) Il est possible de durcir les procédures d'homologation des produits phytosanitaires. Cela revient implicitement à réduire le nombre de molécules pouvant être homologuées. Ce cas extrême est une solution au problème environnemental, mais il touche aussi des enjeux agronomiques, sociaux et économiques qui dépassent largement le cadre de cette étude ;
- (2) Il est possible de réévaluer l'impact environnemental et toxicologique des molécules déjà homologuées, et d'interdire celles qui posent le plus de problème. Les enjeux sont les mêmes que dans le cas précédent ;
- (3) L'industrie phytopharmaceutique peut tenter, dans la mesure du possible, d'obtenir des substances actives qui sont moins toxiques pour les organismes vivants non ciblés par le traitement phytosanitaire.
- (4) L'industrie peut aussi tenter de trouver des molécules plus efficaces, et donc applicables à des doses plus faibles ;
- (5) Pour une molécule d'activité / d'efficacité donnée, l'agronome et l'agriculteur peuvent tenter d'appliquer le produit phytosanitaire à des doses plus faibles que les doses usuelles / préconisées ;

Une telle mesure doit – pour espérer être efficace – s'accompagner de mesures agronomiques visant à augmenter la compétitivité de la culture : sélection de cultivars plus résistants et compétitifs ; augmentation des densités de semis (herbicide) ; rotations ; implantation d'un couvert végétal secondaire / en interculture ; Fertilisation ciblée,... (e.g. Blackshaw *et al.*, 2006).

- (6) Le moment de l'apport peut être modulé en fonction des prévisions météorologiques à court terme, notamment en fonction des évènements pluvieux possibles;
- (7) La dose appliquée peut être modulée en fonction de la sensibilité du milieu agricole et naturel aux transferts de pesticides.

L'étude présentée ici s'inscrit dans le cadre de cette dernière possibilité. La stratégie de raisonnement de l'apport en fonction du milieu peut elle-même se décliner en plusieurs stratégies, se distinguant autant par leur précision que par le coût de leur mise en œuvre (et donc leur faisabilité) :

- (i) Il est possible de combiner une approche bibliographique (état des lieux des connaissances actuelles) à une expertise régionale / locale des sols et des problèmes de pollution diffuse par les pesticides ;
- (ii) Il est possible d'utiliser des indicateurs de risque. Ces indicateurs fournissent une estimation des risques en fonction de données simples à obtenir, mais ils ne permettent pas de prédictions quantitatives (importance des fuites en fonction du sol, de la météo...).
- (iii) L'approche la plus complexe, et donc la plus lourde à mettre en œuvre consiste à utiliser des modèles⁴ pour (tenter de) prédire les quantités de produit

⁴ Programmes informatiques reproduisant les processus en jeu.

phytosanitaire pouvant être transférées vers les ressources en eau, suivant différentes conditions agronomiques, pédologiques et géologiques.

L'étude présentée ici s'inscrit dans le cadre d'une approche d'évaluation du risque par modélisation mécaniste des transferts de produits phytosanitaires dans les sols (point iii).

■ 2.4 Programme de recherche ESHEL



figure 1 – Articulation entre le travail de thèse et le programme ESHEL.

Le travail de thèse présenté dans ce document s'inscrit dans le cadre d'un programme d'évaluation des risques de lixiviation des produits phytosanitaires à travers le sol. Ce programme de recherche, le programme ESHEL, porte sur un secteur agricole de Beauce chartraine de 2600 ha, centré autour de la commune de Ouarville.

La figure 1 ci-dessus montre l'articulation entre le programme ESHEL et le travail de thèse.

Ce programme de recherche intervient en complément de plans d'actions de lutte contre les pollutions diffuses par les produits phytosanitaires menés par les instances agricoles départementales, régionales et nationales (Ministère en charge de l'agriculture, ministère en charge des questions d'environnement, GREPPPES, Chambre d'Agriculture d'Eure-et-Loir...).

2.5 Limites méthodologiques

Les processus physiques, chimiques et biologiques exposés ci-dessus sont théoriquement 'valables' dans la plupart des zones cultivées (tempérées) de la planète. Leur importance relative dans le transfert de produits phytosanitaires est cependant modulée <u>très fortement</u> par les caractéristiques locales du milieu naturel, ainsi que par les caractéristiques de la molécule. Certains phénomènes peuvent être atténués, jusqu'à devenir négligeables, si le contexte leur est 'défavorable' (et inversement). Ainsi les phénomènes de ruissellement et d'érosion sont moins importants quand le relief est peu marqué. De la même manière, les phénomènes de transport de molécules par convection sont moindres quand celles-ci sont très

fortement adsorbées sur la phase solide du sol.

Les processus importants pour les transferts de pesticides font généralement l'objet de plusieurs 'modèles' (équations) de fonctionnement. Ces modèles ont des conditions d'application, des hypothèses sous-jacentes et une complexité variables. Le choix de l'une ou l'autre équation dépend du contexte dans lequel elle doit être utilisée (propriétés du milieu, moyens disponibles...).

Pour toutes ces raisons les travaux d'évaluation des risques de transfert de pesticides dans les sols (puis vers la ressource en eau) sont intrinsèquement et fortement limités. En effet :

- (a) Il est techniquement et financièrement inenvisageable de mesurer les propriétés d'interaction avec le sol de toutes les molécules phytosanitaires utilisées dans un secteur agricole donné. Il faut nécessairement en choisir une (ou quelques-unes) en fonction de ses/leurs caractéristiques physico-chimiques, des enjeux sanitaires locaux, et des objectifs scientifiques de l'étude.
- (b) Une caractérisation parfaite de la couverture pédologique est rigoureusement impossible. La représentation du sol et de ses variations passe forcément par un échantillonnage portant sur une portion très limitée du sol (au regard de son volume total) et par des choix techniques et scientifiques très ciblés sur la nature du 'modèle de variation' envisagé. Cette limitation et les choix qui en découlent ont des conséquences fortes sur les incertitudes liées à la représentation du sol.
- (c) Il est techniquement inenvisageable de prendre en compte tous les processus (et leurs solutions) possibles pour expliquer – ou prédire – le 'comportement' des pesticides dans les sols. Le choix des processus étudiés doit être guidé par les caractéristiques de la couverture pédologique et des pratiques agronomiques, par les propriétés de la molécule, et par les objectifs scientifiques de l'étude. Comme pour la représentation du sol, ces choix ont des conséquences fortes sur les incertitudes liées à la représentation des processus.
- (d) Chacun des 3 points exposés ci-dessus ne peut être traité indépendamment des autres, du fait des interactions fortes entre les caractéristiques de la molécule et celles du sol ainsi qu'entre la représentation des processus et celle du sol.

De ce fait, les objectifs de ce travail, exposés ci-dessous, sont cadrés par des choix méthodologiques initiaux, reposant sur des hypothèses préalables quant aux sols étudiés et aux processus en jeu. Ces choix méthodologiques sont bien sûr discutables sur le plan scientifique, ils n'en conditionnement pas moins les résultats et la portée de l'étude.

3 Objectifs

■ 3.1 Choix méthodologiques initiaux

Les objectifs du travail de thèse ont été définis à partir de choix méthodologiques initiaux permettant de cadrer les recherches.

Le travail porte sur les sols d'un **secteur agricole de 2600 ha** centré autour de la commune de Ouarville, en Beauce chartraine. La nappe de Beauce était (et est toujours) contaminée à des niveaux variables par des produits phytosanitaires, notamment dans le secteur étudié.

- Une seule molécule est étudiée, l'isoproturon. La molécule est largement utilisée et, au même titre que le chlortoluron (de la même famille des urées substituées), elle est fréquemment retrouvée dans les eaux souterraines.
- Le travail porte essentiellement sur la couche de sol cultivée, et non sur les couches de sol sous-jacentes. L'horizon de surface est en effet crucial pour l'adsorption et la dégradation des pesticides.
- En parallèle des objectifs exposés ci-dessous, le travail doit permettre l'acquisition d'un jeu de mesures permettant de paramétrer un modèle de transfert de pesticides dans les sols. La modélisation permet, une fois les propriétés importantes mesurées, d'évaluer leurs effets combinés sur les transferts de pesticides.

Ce modèle doit être basé sur des équations à base physique (modèle dit mécaniste) permettant de rendre compte :

- Des transferts d'eau verticaux ;
- Du transport de soluté par convection ;
- De l'adsorption du soluté sur la phase solide du sol ;
- De la dégradation du soluté dans le sol.

En raison du contexte pédologique et topographique local, **le travail de thèse ne porte pas sur** :

- Les transferts⁵ par ruissellement et érosion. Le relief local étant très peu marqué, on estime que les pertes d'eau, de sol et de solutés par ruissellement et érosion sont négligeables ;
- Les transferts via les fissures ou les macropores. Un précédent travail a permis de montrer que les flux de macropores sont probablement négligeables dans le secteur étudié. La molécule étudiée est appliquée à l'automne, et la période critique des transferts va de l'automne au printemps. Aucune fissuration du sol n'a été observée à cette période, le sol étant relativement humide et peu 'gonflant' (des fissures sont par contre observées en été à la surface du sol);
- Le transport colloïdal. Cet aspect est négligé autant pour des raisons de moyens que pour l'absence d'évidence de transport profond de colloïdes.

⁵ Transferts d'eau et de soluté.

- La réalisation d'un 'modèle spatial des sols' cohérent avec la variabilité spatiale des sols et des processus étudiés. Il s'agit d'un autre volet du programme ESHEL.
- Quand différentes équations sont possibles pour rendre compte des processus étudiés ci-dessus, les solutions les plus simples à paramétrer ont été choisies;
- Le corollaire du point précédent est que ce travail doit privilégier l'évaluation de la variabilité spatiale des propriétés du sol et de l'interaction sol-isoproturon plutôt que la complexité locale des processus, en restant dans le cadre d'une modélisation mécaniste. Une des conséquences de ce choix est un nombre plus important d'échantillons évalués, mais une moindre complexité des méthodes de mesure choisies.

En effet, la recherche sur les transferts de pesticides dans les sols peut privilégier deux options : (a) **Mieux comprendre et mieux décrire les processus en jeu** ou (b) **mieux comprendre et mieux décrire la variabilité spatiale des processus**. Ces deux options sont **complémentaires** : dans une optique de recherche appliquée, il est inutile de mieux rendre compte des processus si on ne sait pas les évaluer à une échelle large, mais il est aussi inutile de réaliser des évaluations à une échelle plus large si certains processus essentiels sont mal pris en compte... La limitation des moyens oblige à privilégier alternativement l'une ou l'autre des options, et c'est la deuxième qui a été choisie pour ce travail. Le programme ESHEL, situé quant à lui à l'interface de ces deux options complémentaires, a pour but d'établir des connections (transferts d'échelle) entre plusieurs échelles de mesures : Le profil de sol, la parcelle agricole et une portion de bassin versant ('secteur agricole').

Les flux d'eau préférentiels⁶ sont soupçonnés d'expliquer une partie des pollutions diffuses par les produits phytosanitaires. Des travaux antérieurs dans le secteur de Ouarville ont permis de mettre en lumière certaines limitations des modèles de transport de pesticides qui ne tiennent pas compte de ces flux préférentiels, ou qui les décrivent par une compartimentation entre une microporosité et une macroporosité. Il a été choisi d'explorer une troisième voie : **les modèles hydriques à eaux mobile et immobile**.

3.2 Objectifs du travail de thèse

Le travail de thèse cherche à répondre aux questions et objectifs suivants :

- Quel est le niveau de variabilité spatiale des processus étudiés ?
- Parmi les propriétés du sol mesurées et les paramètres agronomiques pris en compte, lesquels sont déterminants pour les processus étudiés ?
- Parmi les processus étudiés, lesquels pourraient être prépondérants, au vu de leur intensité et de leur variabilité spatiale, dans les transferts de l'isoproturon à l'échelle du secteur agricole étudié ?

Les conclusions sur cet aspect doivent <u>par la suite</u> être validées par une modélisation des transferts d'isoproturon à l'échelle du secteur étudié.

 Quelles sont les conséquences du choix méthodologique privilégiant l'estimation de la variabilité spatiale au détriment de la complexité des processus suivis, et notamment :

⁶ Flux préférentiels : Flux d'eau se produisant à une vitesse plus rapide que ce qui est envisageable avec la théorie classique de Richards. Voir le paragraphe « Flux préférentiels », p. 53.

- Les incertitudes liées aux mesures et méthodes choisies ;
- Les biais éventuels dans la modélisation des processus.

La réponse à ces questions doit permettre de dégager des hypothèses sur les perspectives du travail :

- Quelles sont les conséquences des niveaux de variabilité spatiale des propriétés du sol et des processus sur la pertinence des différentes solutions de 'modèle spatial des propriétés du sol';
- Au vu des niveaux de variabilité spatiale des propriétés du sol et des processus, l'utilisation de modèles à base physique est-elle l'option la plus pertinente pour les travaux d'évaluation à l'échelle du bassin versant ?

■ 3.3 Organisation du mémoire de thèse

Le mémoire de thèse présenté ici est organisé en suivant le schéma très classique « Introduction – revue bibliographique – matériels et méthodes, résultats – Discussion, conclusion et perspectives ». Le secteur agricole étudié, ses caractéristiques géographiques, climatiques, géologiques et pédologiques, peuvent être vus comme un 'matériel' étudié ou comme une revue de la bibliographie <u>locale</u>. Il a donc fait l'objet d'une partie dédiée, séparée, après la revue bibliographique et avant les matériels et méthodes : « Le secteur agricole de Ouarville ». L'isoproturon peut aussi être vu comme un 'matériel' et faire l'objet d'une revue bibliographique de son comportement dans les sols : il a été intégré à la revue bibliographique. Par ailleurs, certains aspects de la bibliographie, spécifiques aux méthodes employées, sont présentés avec ces dernières (matériels et méthodes) plutôt que dans la revue bibliographique.

Les 3 grandes parties « revue bibliographique – matériels et méthodes, résultats » suivent la **même organisation interne**, dans le sens d'une hauteur de vue croissante sur le travail. On s'intéresse (a) dans un premier temps aux constituants de base du sol, (b) puis à la structuration et à l'organisation de ces constituants, (c) ensuite à la manière dont l'eau circule dans les sols, (d) à la manière dont les solutés se comportent avec l'eau; (e) Le comportement des pesticides en général et de l'isoproturon en particulier dans le sol est ensuite examiné, avec son adsorption et sa dégradation; (f) Enfin, le relations des différentes propriétés les unes par rapport aux autres sont examinées par différents **tests statistiques**, dans un ordre de complexité croissante : relation des propriétés deux à deux, approche multivariée, mise en œuvre et examen critique d'une modélisation statistique des relations entre propriétés.

Des éléments de synthèse et de discussion sont introduits progressivement dans les résultats, à la fin de chacune des parties présentées ci dessus. Les aspects les plus transversaux de la synthèse et de la discussion sont exposés dans la partie V, accompagnés des perspectives.

J. Moeys | Partie I

Partie I Étude bibliographique

Flux d'eau et transferts de pesticides dans les sols : les processus et leur variabilité spatiale

1 Le sol : constituants & organisation

Le sol est constitué de 3 phases, une phase solide, une phase liquide et une phase gazeuse. Chacune de ces phases peut être caractérisée indépendamment des autres, mais elles sont en réalité intimement mêlées. Ce mélange n'est pas 'amorphe', et on distingue différents niveaux (différentes échelles) d'organisation dans l'agencement de ces constituants. Le sol est un milieu tridimensionnel organisé, structuré, qui peut être observé sur des échelles dont les dimensions varient de plusieurs ordres de grandeur, depuis l'agencement des feuillets minéraux des argiles qui composent sa phase solide, jusqu'à l'agencement complexe des couches de sol qui constituent la couverture pédologique.

La définition des différents niveaux d'organisation du sol permet de mieux comprendre quelles parties de ce dernier sont étudiées (dans le cadre de ce travail), quand les apparences ne montrent qu'un milieu continu et hautement hétérogène.

1.1 Phase solide, phase liquide et phase gazeuse du sol





A la pression atmosphérique et aux températures compatibles avec la croissance des plantes, le sol est constitué de 3 phases entremêlées. Une phase solide, constituée de minéraux, d'associations de minéraux et de constituants organiques ; une phase liquide constituée d'eau, aussi appelée solution du sol ; et une phase gazeuse, aussi appelée l'atmosphère du sol, dont la constitution est proche de l'air atmosphérique.

Bien que ces trois phases soient entremêlées, chacune d'elle peut être définie par

sa masse, et par le volume qu'elle occupe dans le sol. La figure 2 illustre la répartition des masses et des volumes du sol, comme deux points de vue sur un même objet.

Les particules minérales et les constituants organiques qui constituent la phase solide ne sont pas regroupés en bloc comme le suggère la figure 2, mais sont disposées selon un arrangement complexe qui dégage des **espaces libres**, la **porosité**, parfois appelée abusivement '**vides**' du sol. Le volume total du sol est donc constitué du volume occupé par la phase solide, et du volume des espaces laissés libres.

Les volumes libres sont occupés par la phase liquide (l'eau) et par la phase gazeuse du sol (l'air). La phase liquide remplit une partie des espaces libres, et la phase gazeuse remplit les espaces laissés libres par le solide et par la phase liquide. Si l'eau vient à percoler ou à s'évaporer, de l'air la remplace. Si de l'eau supplémentaire s'infiltre dans le sol, elle chasse l'air des espaces libres. En résumé, la phase solide (minérale) occupe un volume constant (ou considéré comme tel à court terme) dans le sol. La phase liquide (eau), en quantité très variable, occupe tout ou partie du volume laissé libre par la phase solide. La phase gazeuse (air) occupe l'espace restant.

Le '**sol sec**' est une appellation commune pour désigner le sol sans sa phase liquide (remplacée par de l'air). On obtient ce sol sec par un séchage prolongé à 105° C, mais le terme désigne aussi communément la phase solide d'un sol (sol qui n'a pas forcément été séché). Ainsi, on exprimera **l'abondance des différentes fractions** qui constituent la phase solide du sol en unité de masse par unité de masse de sol sec (e.g. : g de CaCO₃ . kg de sol sec⁻¹).

La **solution du sol** désigne la phase liquide du sol et les éléments solubles ou en suspension qui s'y trouvent. Ces éléments peuvent être des substances chimiques, des molécules organiques ou des particules en suspension (colloïdes).

■ 1.2 Phase solide du sol : constituants

La phase solide du sol peut être décrite par deux propriétés essentielles :

- Les natures lithologiques / minéralogiques des constituants minéraux, et la nature biochimique des constituants organiques ;
- Les caractéristiques de la distribution des tailles des particules qui le constituent. Cette distribution est segmentée en fractions granulométriques (classes de tailles de particules) dont les tailles limites sont normalisées⁷.





figure 3 – Fractions granulométriques fines et grossières du sol.

Les tailles de particules sont représentées sur une échelle logarithmique. Avec A : argile ; LF : limons fins ; LG : limons grossiers ; SF : sables fins ; SG : sables grossiers ; GR : graviers ; CX : cailloux [2cm;7,5cm]. Il existe d'autres fractions grossières non représentées ici : Les pierres [7,5 cm;25 cm] et les blocs (> 25 cm). AFNOR X 31-003, 1998*b*.

L'étude de la nature minéralogique des constituants est essentielle pour

⁷ Au niveau national. La 'norme' varie malheureusement d'un pays à l'autre.

comprendre l'origine géologique et pédogénétique du sol. Elle n'est cependant pas étudiée systématiquement quand ces questions sont secondaires.

La granulométrie du sol est étudiée systématiquement. On distingue les fractions fines (inférieures à 2 mm) des fractions grossières (supérieures à 2 mm). Fractions fines et fractions grossières sont elles même subdivisées, comme illustré par la figure 3.

L'abondance relative des fractions argileuses, limoneuses et sableuses est exprimée en grammes de fraction (sèche) par kilogramme de terre fine totale (sèche) $[g.kg^{-1}]$ ou en pourcentage de la terre fine totale.

La norme X 31-107 (AFNOR 2003), présente la méthode d'« analyse granulométrique par sédimentation » et fournir les tailles limites de différentes fractions granulométriques de le terre fine < 2 mm. La norme NF X 31-003, (AFNOR 1998*b*), présente la méthode de « description du sol » et donne les tailles limites des différentes fractions grossières.

Granulométrie des constituants : texture du sol



figure 4 – Triangle des textures de la Chambre d'Agriculture de l'Aisne et ses 15 classes de textures.

Les classes de textures sont figurées en grisé ; Avec ALO : argile lourde ; AS : argile sableuse ; A : argile ; AL : argile limoneuse ; SA : sable argileux ; LSA : limon sablo-argileux ; LAS : limon argilo-sableux ; LA : limon argileux ; S ; sable ; SL : sable limoneux ; LS : limon sableux ; LMS : limon moyen sableux ; LM : limon moyen ; LLS : limon léger sableux ; LL limon léger.

En regroupant les limons fins et les limons grossiers sous l'appellation 'limons totaux' ou 'limon', et en regroupant les sables fins et les sables grossiers sous l'appellation 'sables totaux' ou 'sable', on aboutit à **3 fractions de terre fine** (avec l'argile) qui peuvent être représentées sur un graphique triangulaire à 3 axes (ou alternativement sur 2 axes, la 3^e fraction étant le complément à 100%). Ces graphiques sont appelés **triangles de texture**. Les pédologues ont défini différentes aires sur ces triangles de texture, **les classes de texture**, **en fonction des différences de texture qu'il est possible d'apprécier par des tests tactiles sur le**

terrain.

La figure 4 présente le triangle des textures établi par la Chambre d'Agriculture de l'Aisne, qui est le triangle des textures utilisé pour cette étude (Jamagne, 1967).

On peut représenter les caractéristiques granulométriques d'un échantillon sur le triangle par un point positionné en fonction de ses proportions d'argile, de limon et de sable. Cela permet d'attribuer une classe de texture à un échantillon, et de comparer visuellement la granulométrie de plusieurs échantillons. Sur le terrain, c'est le procédé inverse qui est utilisé. Les sensations tactiles et le comportement de l'échantillon déterminent sa classe de texture. On peut alors estimer sa granulométrie à partir des teneurs moyennes en argile, limon et sable de sa classe.

Mulla et McBratney (2002) indiquent que le coefficient de variation (CV) de la teneur en argile est classiquement compris entre **16** et **53%**, relativement en accord avec les variabilités indiquées par Vauclin (1982) ou Warrick et Nielsen (1980).

■ Constituants organiques

La phase solide du sol est constituée de deux parties de nature chimique distinctes. Une partie minérale, de loin la plus abondante⁸, qui dérive des matériaux géologiques aux dépens desquels le sol s'est développé, et une partie organique, qui dérive des débris végétaux tombés au sol et progressivement altérés et intégrés à celui-ci. Une partie de ces débris est intégrée par la faune ou la microflore du sol. Un autre pool de produits de l'altération des résidus végétaux forme de nouvelles molécules organiques, par altération et/ou par condensation éventuelle d'une partie des produits de l'altération, ou produite par les microorganismes du sol. Cette formation de molécules organiques est appelée humification (Gobat et al., 2003). La phase ultime de l'altération des matières organiques du sol est sa minéralisation (transformation en molécules inorganiques), soit directement lors de son altération (minéralisation primaire), soit à partir des matières organiques humifiées (minéralisation secondaire). La macrofaune du sol (vers de terre, arthropodes, etc.), et la microflore (bactéries, champignons, etc.), morte ou vivante, et leurs sécrétions / excrétions, ont un rôle de premier plan sur le fonctionnement et les propriétés de cette matière organique. La quantité de débris végétaux qui arrive au sol chaque année, et les vitesses des différents processus (intégration biologique, humification, minéralisation) déterminent l'équilibre qui s'établit entre eux et la quantité globale de matières organiques stockée dans le sol. Les natures biochimiques des matières organiques sont très variées, de même que leur temps moyen de résidence dans le sol (lié à leur stabilité). La nature biochimique des matières organiques et les processus qui aboutissent à leur formation et leur minéralisation ne sont pas développés ici, du fait notamment de leur complexité. La nature biochimique des matières organiques n'en est pas moins essentielle, notamment pour la réactivité du sol vis-à-vis des substances organiques anthropiques / exogènes qui peuvent y être apportées (e.g. Ahmad et al., 2006).

La partie organique du sol est caractérisée en premier lieu par son abondance, exprimée en grammes de matières organiques par kilogramme de terre fine $[g.kg^{-1}]$, comme pour les fractions granulométriques. Le carbone est un élément majeur dans la constitution des molécules organiques. Le dosage du carbone organique du sol est plus aisé que celui de la matière organique totale. Pour cette raison, on utilise souvent la teneur en carbone organique comme expression de l'importance de la partie organique du sol (exprimée aussi en $[g.kg^{-1}]$). Le rapport entre la teneur en matière organique et la teneur en carbone organique est <u>relativement</u> constant. Ce rapport se situe en général autour de 1,72 g de matières organiques par

⁸ À l'exception notoire des sols de tourbes et des horizons de surface sous forêt.

g de carbone organique. Ce rapport est généralement utilisé pour estimer la teneur en matière organique à partir de la teneur en carbone organique.

La teneur en matière organique des sols cultivés est un paramètre **fortement dépendant des pratiques culturales**, notamment du retour des débris végétaux au sol (pailles exportées ou non) et de la profondeur d'homogénéisation de la couche de sol travaillée. A titre d'exemple, Jenkinson et Coleman (1994) ont déterminé, sur des expériences à long terme menées en Angleterre (dont l'expérience de Rothamsted), que l'apport de carbone organique peut varier de 0,15 g.ha.an⁻¹ sur un sol nu et désherbé à 2,95 g.ha.an⁻¹ sur un sol cultivé et fertilisé, la teneur en carbone organique de ces mêmes sols passant de 14,2 à 7,9 g.kg⁻¹ et de 10,6 à 11,3 g.kg⁻¹ (*entre 1870 et 1969 et entre 1955 et 1971, respectivement*). L'effet des pratiques culturales sur la **teneur en carbone organique peut modifier les 'qualités' agronomiques d'un sol** (Loveland et Webb, 2003).

La teneur en carbone organique est un paramètre dont la variabilité spatiale est moyenne à élevée (relativement aux autres propriétés du sol). Mulla et McBratney (2002) indiquent ainsi que le coefficient de variation (CV) de la teneur en matière organique varie entre 21 et 41 %. Sur 1,5 ha, Lafrance et Banton (1995) mesurent une teneur en carbone organique de 1,9 % (de la masse totale du sol) avec un CV de 30 % (n = 110 échantillons). Vauclin (1982) rapporte des teneurs de 0,3 % et de 2,2 %, avec des CV de 100 % et 54 % (citant Luxmoore et Sharma, 1980 et Cipra et al. 1972). Sur 1.8 ha et 99 échantillons, Lennartz (1999) mesure une teneur en carbone organique de 1,19 % avec un CV de 26 %. Sur 5 ha et 20 échantillons Walker et al. (2001) reportent une teneur en carbone organique moyenne de 1,5 % avec un CV de 9%*. Non loin de là, sur 1,44 ha et 20 échantillons, Rodriguez-Cruz et al. (2006) mesurent 1,67 % de carbone organique, en moyenne, avec un CV de 26,9 %. Sur 9 horizons-référence, du sol de surface d'un bassin versant de 250 ha, Morvan et al. (2004) mesurent une teneur en carbone organique entre 0,12 et 3,3 %, et un CV inter horizon-types de 67,4%*. Sur différents types de sols présents en Lorraine (n = 13), Boivin et al. (2006) mesurent des teneurs en carbone organique (de surface) entre 0,63 % et 3,51 %, avec un CV de 47,2 %*. A une échelle nationale ou supranationale, Nemes et al. (2005) reportent des teneurs moyennes en carbone organique de 1,27 %, 2,05 % et 0,64 %, avec des CV de 94,5 %, 74,6 % et 123,4 % pour les bases de données européenne (HYPRES, Wösten et al., 1999, n = 1108), hongroises (HUNSODA, Nemes, 2002, n = 131) et nordaméricaine (Rawls et al., 1998, n = 886). [*: calculs à partir des données de la publication]

Il ressort de cette analyse (*incomplète*) de la littérature que la teneur en carbone organique des sols cultivés est moyennement variable à l'échelle de la parcelle, moyennement à très variable à l'échelle du secteur agricole (inter parcelle) et probablement très variable aux grandes échelles où les différences agronomiques comme pédologiques sont importantes.

Mulla et McBratney (2002) indiquent que la portée (variographique) de la teneur en matière organique varie entre 112 et 250 m. Il parait évident que ces données doivent être relativisées en fonction du contexte agronomique, notamment pour intégrer l'effet de la taille moyenne des parcelles, de la diversité des pratiques culturales locales et/ou de leur évolutions récentes (*sur ce dernier point*, voir Chevallier *et al.*, 2000).

■ Complexe argilo-humique

La matière organique est intimement mêlée à la matière minérale du sol, notamment les fractions les plus fines (argiles), et forme avec elles ce que l'on appelle le **complexe argilo-humique** (e.g. Gobat *et al.*, 2003 ; Bronick et Lal, 2005). Outre le fait qu'il est l'un des principaux liguant / ciment qui soude les particules de plus grande

taille (limon, sable) entre elles, le complexe a une importance capitale pour les interactions entre la phase solide du sol et les molécules solubilisées dans sa phase liquide (soluté de la solution du sol).

L'approche retenue dans ce travail néglige les aspects relatifs à la nature minéralogique ou biochimique du complexe argilo humique, au profit d'autres propriétés agronomiques et pédologiques du sol. Pour cette raison, les caractéristiques du complexe argilo-humique ne sont pas détaillées.

Masse volumique de la phase solide

$$\rho_s = \frac{M_s}{V_s}$$

équation 1 – Masse volumique de la phase solide du sol.

Avec ρ_s [M.L⁻³] (kg.m⁻³) la masse volumique réelle du solide, qui est aussi la masse volumique moyenne des différents minéraux et constituants organiques qui constituent la phase solide ; M_s [M] (kg) la masse de solide ; V_s [L³] (m³) le volume occupé par le solide.

La masse volumique de la phase solide du sol désigne la masse de la phase solide rapportée au volume qu'elle occupe, <u>sans les vides éventuels</u>. **On assimile communément, mais abusivement, la masse volumique du solide à sa densité**. Cette dernière, adimensionnelle, est égale à la masse volumique du solide rapportée à la masse volumique de l'eau. Comme la masse volumique de l'eau est égale à 1 g.cm⁻³, masse volumique et densité apparente ne différent souvent que par l'unité dans laquelle elles sont exprimées.

Il est possible en séchant le sol de connaître la masse de la phase solide. Accéder au volume de cette phase solide requiert un dispositif expérimental plus complexe, qui n'est généralement pas mis en œuvre. **On mesure rarement la masse volumique du solide**. Cette dernière est pourtant utile pour estimer d'autres propriétés du sol, comme le volume des vides.

La phase solide des sols des régions tempérées a une masse volumique généralement située entre 2,6 et 2,7 g.cm⁻³, avec une moyenne proche de 2,65 g.cm⁻³, la masse volumique du quartz (Kutílek et Nielsen, 1994).

■ Niveaux d'organisation du sol et structure

L'agencement entre les constituants (organiques et minéraux) de la phase solide du sol et les espaces libres qu'ils délimitent (abstraction faite des phases liquides et gazeuses) peut être décrit à différentes échelles.

Le premier niveau d'organisation est celui de l'agencement de particule à particule, qui laisse des **espaces interparticulaires** libres. Sous l'effet des racines et de la macrofaune du sol, des espaces aux formes généralement arrondies se distinguent. Ces derniers sont appelés **pores biologiques de taille variable** dont l'agencement **forme un réseau**. La microflore du sol, sa macrofaune et les racines qui s'y implantent ou qui la créent sont aussi à l'origine d'une **agrégation des particules** de sol entre elles, notamment sous l'effet de sécrétions diverses. Le volume de la phase liquide du sol est très variable. Celui-ci subit des cycles d'humectation et de dessiccation répétés au fil des évènements météorologiques et des saisons. Les fractions les plus fines (et/ou les plus organiques) de la phase solide du sol n'ont pas un volume fixe. Les alternances d'humectation et de dessiccation provoquent de faibles variations de volume des fractions fines qui aboutissent finalement à l'individualisation de **surfaces de fissuration**. L'agrégation des particules et les espaces libres qui les individualisent désignent la structure du sol au sens pédologique du terme. Cette dernière s'exprime sur des échelles variées, depuis l'échelle infra-millimétrique à l'échelle décimétrique.

L'ensemble des espaces libres du sol est communément appelé porosité du sol. Ces espaces libres étant pour la plupart interconnectés, on utilise aussi le terme de réseau poral.

C'est à travers cette porosité que l'eau du sol circule. La manière dont l'eau est retenue par le sol, et la manière dont elle circule dans le sol sont intrinsèquement liées aux caractéristiques de cette porosité (diamètres des pores, géométrie ; e.g. Connolly, 1998 ; Crawford, 1994 ; Kutílek, 2004), ainsi qu'aux propriétés de la phase solide du sol (par exemple l'hydrophobicité des matières organiques).

La structure du sol est influencée *conjointement* par la granulométrie du sol et la minéralogie des argiles, par la composition chimique de la solution du sol (cations, en relation avec la CEC), par les matières organiques, par le couvert végétal et le fonctionnement biologique du sol. La structure varie avec la profondeur et elle est modulée par le climat et les pratiques agronomiques (cf. Kay et Angers, 2002).

Masse volumique apparente

La masse volumique apparente du sol est la masse de la phase solide du sol par unité de volume total du sol. Le volume total du sol est le volume occupé par la phase solide plus le volume occupé par les espaces libres (volume d'eau et volume d'air).

$$\rho_{app.} = \frac{M_s}{V_{tot}} = \frac{M_s}{V_s + V_E + V_A}$$

équation 2 – Masse volumique apparente du sol.

Avec ρ_{app} [M.L⁻³] (kg.m⁻³) la densité apparente du sol ; M_S [M] (kg) la masse de solide ; V_S [L³] (m³) le volume occupé par le solide ; V_E, le volume occupé par la phase liquide (Eau) ; V_A, le volume occupé par la phase gazeuse (Air).

Si on connaît la masse volumique apparente, et qu'on estime la masse volumique du solide, on peut avoir une estimation de la porosité du sol. Plus la masse volumique apparente est faible, plus la porosité est élevée, et inversement. L'estimation de la porosité établit un lien indirect entre la masse volumique apparente et les propriétés hydriques du sol (rétention et circulation de l'eau dans le sol). Ce lien est toutefois limité car la densité apparente ne renseigne en rien sur les caractéristiques intrinsèques de la porosité, comme les diamètres de pores ou la tortuosité du réseau poral, ni sur la phase solide du sol qui joue aussi un rôle sur les flux d'eau.

$$porosit\acute{e} = \frac{V_{libre}}{V_{tot}} = \frac{V_E + V_A}{V_{tot}} = 1 - \frac{\rho_{app.}}{\rho_S} \simeq 1 - \frac{\rho_{app.}}{2,65}$$

équation 3 – Estimation de la porosité du sol.

La porosité est exprimée ici en [L³ de pores . L⁻³ total] ou (m³.m⁻³); V_{libre} [L³] ou (m³) est le volume de la porosité; V_{tot} [L³] est le volume total du sol; V_E, le volume occupé par la phase liquide (Eau); V_A, le volume occupé par la phase gazeuse (Air). ρ_{app} [M. L⁻³] ou (kg.m⁻³) la masse volumique apparente du sol; ρ_{S} [M. L⁻³] la masse volumique réelle du solide, estimée à 2,65 g.cm⁻³.

Vauclin (1982) classe la masse volumique apparente comme faiblement variable. Si

l'on combine cette revue bibliographique à celle de Warrick et Nielsen (1980) (sources citées : Gumaa, 1978 ; Nielsen et al., 1973 ; Cassel et Bauer, 1975 ; Gajem et al., 1981 ; Luxmoore et Sharma, 1980 ; Bascomb et Jarvis, 1976 ; Vauclin et al., 1982) les valeurs moyennes des masses volumiques apparentes s'étalent de 1,25 à 1,63 kg.dm⁻³, avec des coefficients de variation (CV) entre 4 % et 14,5 %. Sur 0,02 ha Luxmoore et Sharma (1980) mesurent une masse volumique apparente moyenne de 1,63 g.kg⁻¹ avec un CV de 10,4 %. Sur 0,4 ha, Vauclin et al. (1982) obtiennent une masse volumique moyenne de 1,29 g.kg⁻¹, et un CV de **4 %**. Sur 1,8 ha et n = 99 échantillons, Lennartz (1999) mesure une masse volumique apparente moyenne de 1,42 g.kg⁻¹ avec un CV de 6,2 %. Gumaa (1978), Gajem et al. (1981), et Nielsen et al. (1973) obtiennent des masses volumiques apparentes moyennes de 1,3, 1,38, et 1,4 g.kg⁻¹ et des CV de 6,9 % **14,5 %**, et **6,8 %** pour 15, 85 et 150 ha, respectivement. Sur 250 ha et 9 sols-types, Morvan et al. (2004) mesurent une masse volumique apparente moyenne de 1,42 g.kg⁻¹ avec un CV de **6,7 %** (inter types), ou entre 1,16 à 1,68 kg.dm⁻³ et 0,6 et 13,7 % (intra type). Aux échelles nationales. Nemes et al. (2005) obtiennent des valeurs movennes de 1,38, 1,25 et 1,63 g.kg⁻¹ et des CV de 7,9 %, 4 % et 14,5 % pour des bases de données européenne, hongroise et nord-américaine (voir le paragraphe Constituants organiques, p. 27). Enfin, signalons que Gajem et al. (1981) et Webster (1977) (cités par Vauclin, 1982) trouvent des longueurs d'autocorrélations de 2 et 33,3 mètres pour la masse volumique apparente.

De cette analyse il ressort que (i) **la masse volumique apparente a une variabilité plutôt faible**. Cette faible variabilité est à mettre en relation avec la gamme de valeurs restreinte que peut prendre la masse volumique apparente d'un sol cultivable. En effet, si l'on se réfère à l'équation 3, un sol ayant une masse volumique de 0,9 kg.dm⁻³ à une porosité de 66 %, ce qui est beaucoup, et un sol ayant une masse volumique de 1,9 kg.dm⁻³ à une porosité de 28 %, ce qui est très faible (*basées sur les valeurs extrêmes citées par* Nemes *et al.*, 2005). Un calcul empirique simple (effectué à l'aide d'un logiciel statistique) montre qu'une population de masses volumiques apparentes ayant une distribution de probabilité uniforme entre 0,9 et 1,9 a un CV proche de **20 %**. (ii) **la variabilité spatiale de la masse volumique apparente ne semble pas liée à l'échelle considérée**. Une variabilité importante est possible à l'échelle d'une petite parcelle agricole comme à l'échelle nationale.

Se basant sur une revue de fonctions de pédotransfert, Tranter *et al.* (2007) proposent un modèle conceptuel de la masse volumique apparente du sol :

$$\rho_{b} = \rho_{m} + \Delta_{\rho} + \epsilon \quad \text{avec} \quad \begin{array}{l} \rho_{m} \approx f\left(granulom\acute{e}trie, P_{s}\right) \\ \Delta_{\rho} \approx f\left(C_{ORG}, \frac{CEC_{Na}}{CEC_{tot}}, W_{s}, \ldots\right) \end{array}$$

équation 4 – Modèle conceptuel de la masse volumique apparente de Tranter *et al.* (2007). Avec ρ_b la masse volumique apparente du sol ; ρ_m la masse volumique 'typique' de la phase solide minérale ; $\Delta \rho$ la variation de masse volumique associée à la structure du sol ; ε le résidu (part de variation non expliquée par le modèle) ; granulométrie : la distribution de taille de particules ; P_s la profondeur considérée ; C_{ORG} la teneur en carbone organique ; $CEC_{Na}/CEC_{tot.}$ la proportion de sodium échangeable ; W_s le travail du sol.

La masse volumique du sol dépend ainsi de la masse volumique des minéraux qui le constituent, leur granulométrie, de la proportion des constituants essentiels pour la structuration du sol comme la teneur en matière organique, de la quantité des cations monovalents échangeables et, bien sûr, par le travail du sol. La teneur en carbone organique est généralement négativement corrélée à la masse volumique apparente du sol, notamment dans les sols forestiers où la matière organique est

quantitativement plus importante que dans les sols cultivés (de Vos *et al.*, 2005). Tranter *et al.* (2007) considèrent la part de variabilité de la masse volumique apparente 'non-expliquée' par les modèles comme essentiellement liée à la **structure du sol**, qui est rarement intégrée dans ces modèles, rejoignant en cela le constat fait par Pachepsky *et al.* (2006) sur les fonctions de pédotransfert hydrologiques.

Variabilité temporelle de la structure

Les caractéristiques de la structure du sol varient à **différentes échelles de temps**. Si l'on réserve généralement les termes de 'stabilité structurale' et de 'résilience de la structure' aux effets des contraintes liées directement ou indirectement aux activités anthropiques (tassement par les engins agricoles, gestion des matières organiques), l'évolution de la structure du sol n'est pas uniquement liée à l'homme. Les **facteurs influençant l'évolution temporelle de la structure** sont le **climat**, **l'activité biologique** et les **activités anthropiques**. Si le climat et l'activité biologique agissent à toutes les échelles de temps (depuis la journée à la durée de la pédogenèse), les activités anthropiques agissent surtout à court et moyen terme (de la journée au siècle). Les effets de ces trois facteurs sur l'évolution de la structure diminuent avec la profondeur du sol. La teneur en matière organique du sol, considérée comme un facteur essentiel de la stabilité structurale, module les effets de ces facteurs.

Les effets directs ou indirects du climat se font par les précipitations, l'évaporation (accompagnée de la transpiration des plantes), la température et le flux de radiation solaire. Les précipitations agissent par l'effet des gouttes de pluie sur le sol et l'éventuelle genèse de la séquence « ruissellement – érosion – sédimentation », mais aussi par l'augmentation de la teneur en eau du sol, qui peut provoquer un éclatement mécanique des agrégats (par compression de l'air qu'ils contiennent initialement), ou une fermeture des fissures par gonflement des particules argileuses du sol. Les précipitations tendent donc à dégrader la structure du sol et à augmenter sa masse volumique. A l'inverse, l'évapotranspiration provoque l'apparition de plan de fissuration par rétraction des particules argileuses. La teneur en eau du sol, indirectement influencée par le climat, module les activités biologiques essentielles des plantes, de la faune du sol et de la microflore. La température et le flux de radiation solaire agissent en modulant l'évapotranspiration et l'activité biologique. Le gel est un important facteur de désagrégation du sol.

L'activité biologique du sol agit à court et long terme sur la structure du sol. L'activité des microorganismes agit indirectement sur la stabilité de la structure, par son action sur la dégradation ou l'humification du sol, et par les exsudats et les hyphes fongiques qui participent à la cohérence interparticulaire. La faune du sol est un facteur de pédoturbation essentiel, notamment par l'effet des vers de terre (Gobat *et al.*, 2003) qui participent activement à la création du réseau de macropores, à la formation d'agrégats organo-minéraux via leurs turricules et au déplacement de matière qu'ils engendrent. Les plantes agissent directement sur la structure par la création d'un réseau de pores de taille intermédiaire, et par leur action sur la teneur en eau du sol (transpiration, et donc les cycles d'humectation-dessiccation, et la formation des plans de fissuration par retrait des particules argileuses ; *cf.* Kay et Angers, 2002).

Pour les sols cultivés, s'ajoutent aux effets décrits ci-dessus les effets des pratiques culturales (e.g. Connolly, 1998; Roger-Estrade *et al.*, 2004; Bronick et Lal, 2005): modalité de travail du sol, cultures implantées et leur rotation, gestion des résidus végétaux, fertilisation et amendements calciques ou organiques. Le travail du sol vise normalement à la création d'une macroporosité structurale. Il a aussi pour effet local ou accidentel de provoquer des tassements du sol, et donc une réduction de la porosité, et pour effet indirect une homogénéisation des premiers centimètres du sol. Certaines

opérations de travail du sol aboutissent à une fragmentation importante des premiers centimètres du sol (lors du semis), qui accentuent les effets de la désagrégation par la pluie et favorisent ainsi la battance. Si la mise en culture provoque généralement une baisse de la teneur en matière organique (par rapport à une prairie ou un sol forestier), la gestion des résidus végétaux, le choix des cultures implantées et des rotations modulent de manière importante le stock global de matière organique et sa dynamique, et donc la stabilité de la structure dans le temps.

La structure et la masse volumique apparente de l'horizon cultivé ne peuvent donc être considérés comme constantes que dans un intervalle de temps limité (quelques jours à quelques semaines) consécutif à une opération de travail du sol. La longueur de cet intervalle dépend de fait de l'intensité des évènements climatiques qui suivent le travail du sol. **Toutes les propriétés du sol influencées par la structure** (propriétés hydriques notamment; e.g. Logson et Jaynes, 1996 ; Angulo-Jaramillo *et al.*, 1997; van Es *et al.*, 1999) **sont susceptibles d'être affectées par les variations temporelles de cette dernière**. En pratique, la variabilité spatiale et la variabilité temporelle des propriétés du sol sont rarement évaluées conjointement, du fait des moyens importants que cela demande. Il est fréquent que les propriétés du sol soient **considérées comme constantes sur la durée d'une étude portant sur une saison culturale**. Cela n'en est pas moins une hypothèse discutable.

Phase solide, pédogenèse et variabilité spatiale

La constitution minéralogique (*et dans une moindre mesure organique*) de la phase solide du sol, ainsi que sa granulométrie fine et grossière, sont des propriétés essentielles de ce dernier. Les 'déterminismes' des caractéristiques de la phase solide sont les facteurs de formation du sol dans son ensemble. La variabilité spatiale des propriétés de la phase solide est donc liée à la variabilité spatiale des sols (*au sens pédologique du terme*). Les déterminismes sont la/les formations géologique/s (matériau/x) dans laquelle/lesquels le sol s'est développé, les phénomènes d'érosion et de redistribution qui ont affecté ces matériaux (et les sols) et les processus pédogénétiques qui ont donné naissance aux sols. Par conséquence, les propriétés de la phase solide du sol dépendent du climat actuel et passé, de l'âge du sol, de la position topographique (et indirectement géographique), et du/des biotope/s (faune et flore) qui s'y est/sont développé/s. Ces facteurs ont été définis sous forme d'un modèle conceptuel, initié par Jenny (1941). Ce modèle est largement employé et développé depuis (e.g. McBratney et al., 2003 ; Salvador-Blanes *et al.*, 2007).

Si la structuration (l'organisation interne) de la phase solide du sol et les caractéristiques de ses constituants organiques sont pour partie dépendant de facteurs agissant à des échelles de temps plus courtes (variations saisonnières du climat, facteurs anthropiques), sa stratification verticale et ses variations latérales (\geq échelle métrique) sont intimement liées à la pédogenèse.

■ 1.3 Organisation du sol en horizons

Caractéristiques

Un sol se développe aux dépens / à partir d'un ou de plusieurs matériaux parentaux (matériaux géologiques). Sous l'action de la pédogenèse, ces matériaux vont évoluer. Ils s'altèrent et se structurent. Des mouvements d'éléments dissous et de particules en suspension s'opèrent parfois, avec des phénomènes d'appauvrissement et d'enrichissement relatif (depuis la partie du sol qui perd des constituants, vers la partie du sol ou du sous-sol qui en gagne).

J. Moeys | Partie I

Les éventuelles différences initiales de matériaux parentaux et la pédogenèse différencient progressivement plusieurs sous-ensembles dans le sol. **Ces sous-ensembles, généralement stratifiés verticalement, parallèlement à la surface du sol, sont appelés horizons**. Une définition plus exacte de l'horizon est donnée dans le glossaire en fin de document (*« Termes de pédologie », p. 275*).

Bien que les horizons se différencient généralement verticalement, ils peuvent aussi se différencier latéralement, ou constituer des inclusions dans d'autres horizons (poches, glosses...).

Les caractéristiques principales des horizons, telles que décrites sur un sondage tarière, sont données dans la partie correspondante des matériels et méthodes (p. 97 et p. 303).

Il est souvent nécessaire d'examiner les caractéristiques morphologiques (constituants, structuration) de tous les horizons qui se succèdent dans un profil de sol pour estimer les processus pédogénétiques et les matériaux parentaux de chacun d'eux. La morphologie et la pédogenèse d'un horizon permettent de le rattacher à un type pédologique particulier (comme ceux définis par le Référentiel Pédologique français de 1995, ou par la classification internationale « World reference base for soil resources », FAO, 1998). La succession des types pédologiques d'horizons, et éventuellement le matériau parental de chacun d'eux permet de rattacher le sol dans son ensemble à un type pédologique (selon les référentiels cités ci-dessus).

1.4 Agencement tridimensionnel des horizons : la couverture pédologique

■ Caractéristiques

Le type de sol est déterminé à partir d'une succession verticale d'horizons. Cette succession, et donc la notion de types de sols est liée à une vision parfois monodimensionnelles du sol (sondage à la tarière), parfois bidimensionnelle (profil de sol) ou tridimensionnelle (le pédon), mais toujours localisée, limitée à une surface de quelques mètres carrés.

L'agencement réel des horizons est défini dans les 3 dimensions de l'espace, pour former un milieu continu qui recouvre les matériaux géologiques sous-jacents. Cet agencement est appelé **couverture pédologique**⁹. La discipline qui porte sur l'étude de sa formation et de son organisation est appelée **'analyse structurale'**. Du fait des moyens importants nécessaires à sa mise en œuvre, l'analyse structurale est rarement appliquée sur de grandes étendues. Elle est plutôt utilisée à des fins de compréhension des **règles de répartition des sols dans le paysage**, règles qui peuvent ensuite être utilisées à une échelle plus petite (sur une surface plus grande).

Description des variations latérales du sol

Comme exposé dans l'introduction, une caractérisation et **une représentation**¹⁰ **exacte du sol sont rigoureusement impossibles**, quelle que soit l'échelle à laquelle il est observé. Partant de ce constant, représenter le sol passe forcément par une **simplification de l'information disponible**. Il est tout d'abord nécessaire de simplifier la description locale du sol. C'est le rôle des typologies des sols locales, nationales ou mondiales. Il faut ensuite estimer les propriétés du sol aux endroits où ce dernier n'a

⁹ Pour une bonne illustration de ces concepts, voir Girard (1983), partie 'introduction'.

¹⁰ Les termes de cartographie (numérique) des sols ou de modèle de la couverture pédologique pourraient également être employés.
pas été observé, c'est le rôle des méthodes d'interpolation, qu'elles soient numériques ou réalisées par expertise empirique. Il faut enfin simplifier la géométrie des objets ainsi définis, c'est le rôle des plages cartographiques ou des pixels des représentations en grille systématique (raster). Les trois étapes sont étroitement liées, les choix méthodologiques de l'une déterminant les choix possibles pour les autres.

Ainsi, même quand les études portant sur le sol n'ont pas la précision nécessaire à une analyse structurale, elles doivent néanmoins tenir compte de la manière dont sont agencés les horizons, de la manière dont ils se répartissent dans le paysage et des niveaux de variabilité spatiale du sol¹¹, afin de choisir au mieux les simplifications appliquées à la représentation du sol.

1.5 Stratification verticale et latérale de l'horizon travaillé : le profil cultural

Dans les sols cultivés, à la stratification naturelle du sol en horizon s'ajoute une stratification verticale et latérale de l'horizon travaillé. Cette stratification s'opère sous l'effet des passages successifs d'outils de travail du sol, et des tassements localisés sous les passages de roue des engins agricoles. Le profil cultural désigne à la fois cette stratification et la méthode employée pour la mettre en évidence (voir Manichon, 1982 ou Roger-Estrade *et al.*, 2004).

La profondeur du profil cultural est la profondeur du sol touchée par le travail du sol et/ou par les tassements. La largeur du profil est au moins celle de l'outil agricole le plus large. Un profil cultural est positionné et décrit sur cette largeur.

Stratification latérale du profil cultural

Les tassements occasionnés par le passage des engins agricoles provoquent une stratification latérale de l'horizon travaillé, et parfois des quelques décimètres de sol sous jacent. Diverses zones sont ainsi distinguées, selon 3 types : (1) le sol situé **sous le passage de roue**. Tassé, sa masse volumique apparente est plus élevée et sa porosité est réduite dans les mêmes proportions. Les passages de roue sont au nombre de deux (ou plus) par passage d'engin ; (2) le sol situé **entre les passages de roues** ; (3) le sol situé à l'**extérieur des passages de roues**. Ces deux derniers sont moins tassés que les passages de roue.

Les tassements sont d'autant plus forts que l'engin est lourd, que ses pneus ont une surface de contact faible et qu'ils sont gonflés à une pression élevée, et que le sol est humide.

Stratification verticale du profil cultural

Les opérations de travail du sol créent aussi une stratification verticale dans le profil cultural. Après la récolte, les résidus de culture sont souvent enfouis sur une dizaine de centimètres avec un outil de déchaumage, ce qui provoque une fragmentation de cette partie de l'horizon de surface. Ensuite, le sol de surface est ameubli par le travail du sol, par retournement s'il s'agit d'un sol labouré, ou par soulèvement et fissuration s'il s'agit d'un sol en travail simplifié. Cette étape, lorsqu'elle s'opère par retournement, efface une partie des effets du déchaumage. Enfin, l'opération de semis s'accompagne généralement d'un travail du sol superficiel, visant à obtenir une structure fine qui assure un bon contact entre le sol et la graine.

¹¹ Dans les limites de ce qu'on en connaît ou de ce qu'on peut en connaître.

États internes du profil cultural

Au-delà des strates latérales et verticales décrites ci-dessus, les opérations de travail du sol créent des hétérogénéités au sein du profil:

- Le labour provoque un partitionnement oblique entre les 'bandes' de sol découpées et retournées par le labour, et la couche de débris végétaux initialement en surface qui se retrouve coincée entre les bandes de labour.
- Dans certains sols, le labour peut engendrer un lissage et un tassement du sol à sa base, d'échelle centimétrique, appelé semelle de labour.
- Si les profondeurs de labour (ou de travail du sol) a été réduite d'une année à l'autre, on a sous le labour le plus récent une zone de quelques centimètres correspondant à l'ancien labour.
- Les passages de roues d'engin agricole provoquent des tassements du sol localisé. Sous l'effet du labour qui suit immédiatement, ou du labour de l'année suivante, ces zones tassées sont fragmentées en mottes. Les mottes tassées obtenues sont appelées mottes delta (Δ), tandis que les mottes friables incluant de la macroporosité visible sont appelée mottes gamma (Γ) et l'état intermédiaire mottes phi (Φ).

Ces stratifications latérales, verticales et internes du profil cultural ne sont pas sans conséquences sur les flux d'eau dans l'horizon de surface (voir par exemple Coutadeur *et al.*, 2002).

2 Les processus de lixiviation des produits phytosanitaires dans les sols

Les raisons de l'utilisation des produits phytosanitaires en agriculture, ainsi que les principales causes des transferts diffus vers les ressources en eau d'une faible fraction des molécules apportées au champ ont été introduites au début de ce document (p. 16). Les processus biologiques, physiques et chimiques qui sont à l'origine des transferts de produits phytosanitaires sont détaillés dans les paragraphes ci-dessous. Dans cette revue bibliographique, les propriétés du sol et de l'interaction solisoproturon, et les processus qu'elles influencent sont détaillées, mais certains aspects qui relèvent plus de la modélisation (intégration des différents processus) ne seront pas présentés.

Les équations qui sont liées plus spécifiquement aux méthodes de mesure employées sont exposées dans les matériels et méthodes.

2.1 Présentation des processus et de leurs interactions

Les processus en jeu, bien que de natures très diverses – physiques, chimiques ou biologiques – et localisés dans différentes phases du sol, interagissent très fortement, comme illustré par la figure 5 ci-dessous. Les pesticides présents dans le sol se répartissent entre les 3 phases du sol (phase gazeuse, phase liquide et phase solide),

dans des proportions différentes selon leur volatilité, leur solubilité ou leur affinité pour la phase solide du sol. Le rôle de la phase solide du sol est particulier, car les molécules se répartissent généralement en surface de cette dernière, à l'interface entre la phase liquide et la phase gazeuse : il s'agit du phénomène d'adsorption. Enfin, une incorporation dans la phase solide du sol se produit parfois pour certaines molécules. Ce phénomène appelé immobilisation, qui aboutit à la formation de résidus liés (résidus non extractibles), a lieu sur des échelles de temps supérieures à ce qui est présenté ici (Barriuso et Benoît, 2007, figure 26).

On peut considérer schématiquement **4 niveaux d'observation** des pesticides dans le sol :

- (i) Les compartiments dans lesquels les pesticides se répartissent, phase gazeuse, liquide et solide ;
- (ii) Les processus qui gouvernent la répartition (équilibre) des pesticides dans les différents compartiments en l'absence de mouvements de solution : la diffusion et l'adsorption.
- (iii) Les processus qui gouvernent les transferts des pesticides dans une solution en mouvement (mouvement dans la porosité du sol), cette dernière 'emportant' une partie des solutés, par convection (accompagnée de dispersion);
- (iv) Les processus physiques, chimiques et/ou biologiques qui aboutissent à la transformation des pesticides (dégradation, aboutissant à la formation de métabolites), et au final à leur minéralisation.





Adapté et modifié d'après Meiwirth (2003). NB : ce schéma ne présente pas les processus de transport en surface du sol, par ruissellement et érosion.

L'eau est un des éléments clés pour expliquer le comportement des pesticides dans les sols. Même en l'absence de mouvements d'eau dans le sol (hydrostatique), la **quantité d'eau présente dans le sol** est cruciale car elle détermine le rapport volumique ou massique entre l'eau et la phase solide, et de là :

- Le potentiel matriciel du sol, ce dernier est en effet intimement lié à la teneur en eau (massique ou volumique) du sol (voir « *Teneur en eau et potentiel matriciel* », p. 41);
- La répartition des molécules de pesticide entre la phase liquide et la surface de la phase solide (« L'adsorption de solutés organiques par la phase solide du sol », p. 56);
- L'activité des micro-organismes du sol, et donc indirectement leur capacité à dégrader les molécules organiques présentes dans le sol (« Dégradation des pesticides dans le sol », p. 60);
- La **biodisponibilité** des molécules pesticides pour ces micro-organismes.

Les différences de potentiel hydrique total qui existent entre les différentes couches de sol, ou au sein de ces dernières, sont à l'origine de **mouvement de la phase liquide du sol** des zones de potentiel bas (très négatif) vers les zones de potentiel plus élevé (plus proche de zéro) (« *Flux et conductivité hydraulique en régime non saturé* », p. 47). L'intensité des flux d'eau générés par les différences de potentiel hydrique dépend d'un paramètre, la **conductivité hydraulique**, qui varie en fonction du potentiel, et donc de la teneur en eau.

Les éléments 'moteurs'¹² de ces flux d'eau – et donc de l'ensemble des processus impliqués dans les transferts de molécules pesticides – sont l'évaporation en surface du sol (et donc le rayonnement solaire et la température extérieure), le prélèvement d'eau racinaire puis sa transpiration par les plantes cultivées, la hauteur des précipitations, ainsi que le drainage vertical ou latéral d'une partie de l'eau du sol sous l'effet de la gravité. Les aspects météorologiques des transferts de pesticides dans les sols ne sont évoqués qu'indirectement dans ce document, mais les caractéristiques climatiques de la zone d'étude sont exposées dans la partie « Données météorologiques », p. 74.

Les mouvements d'eau dans le sol entraînent avec eux les molécules en solution. Ce phénomène, appelé **convection**, a plusieurs conséquences :

- Il s'opère un transfert de masse des molécules d'une partie du sol à une autre. Une partie des molécules pesticides peut ainsi quitter le sol et se retrouver dans la zone non saturée, puis dans la nappe phréatique ;
- Les caractéristiques géométriques de la porosité du sol dans laquelle circulent l'eau et les solutés provoquent une **dispersion** des molécules (on parle de phénomènes de convection-dispersion). Concrètement, un ensemble de molécules partant au même moment d'une profondeur A du sol n'arriveront pas en même temps à la profondeur B.

Avec ou sans mouvements d'eau dans le sol, il existe généralement des **différences de concentration en soluté** (d'un horizon à un autre, d'une gamme de porosité à une autre...). Ces différences engendrent une diffusion des molécules en solution depuis les zones où la solution est plus concentrée vers les zones où la solution est solution moins concentrée : c'est la **diffusion**. La diffusion et la dispersion mécanique présentée plus haut contribuent toutes deux à 'disperser' l'apport de molécule initial.

¹² La figure 96, p. 302, en annexe de ce document, illustre les différents types de variables et leur rôle dans les modèles informatiques de transferts de pesticides. Ces variables sont le pendant 'numérique' des propriétés du sol, des molécules et des processus exposés ici.

- Les molécules organiques en solution peuvent s'adsorber sur la phase solide du sol. Ce phénomène cause une dispersion supplémentaire des molécules par rapport à la 'lame d'eau' lors du drainage, ce qui aboutit à un 'effet retard' des transferts de molécules.
- Avec les mouvements d'eau et de pesticides, les teneurs en eau et les concentrations en pesticides dans la phase liquide (à un endroit donné) évoluent.
 L'équilibre entre les molécules adsorbées et les molécules en solution est modifié, et il doit progressivement se remettre en place.
- De la même manière, la biodisponibilité des molécules pesticides évolue, ce qui va parfois modifier la manière dont ces dernières sont dégradées par la microflore du sol. Cette dégradation peut en effet être fonction de la disponibilité de la molécule (mais pas toujours), et la molécule peut se déplacer dans des couches du sol où sa vitesse de dégradation par la microflore est différente.

La dégradation des molécules pesticides dans les sols est un phénomène complexe, soumis à un ou plusieurs processus d'origines physique, chimique ou biologique. En plus de dépendre de la teneur en eau, elle est modulée par la température du sol, qui dépend elle-même du climat et des propriétés du sol. La dégradation des pesticides permet une atténuation des transferts de ces derniers vers la base du sol.

Il faut signaler que les **molécules pesticides ioniques** voient leur forme chimique évoluer en fonction du pH du sol. Ces changements de forme chimique peuvent affecter l'adsorption de la molécule sur la phase solide du sol, ainsi que sa dégradation par les micro-organismes.

■ 2.2 Processus hydrologiques

Teneurs en eau massiques et volumiques

La quantité d'eau présente dans le sol est exprimée en masse d'eau ramenée à la masse de sol sec (phase solide) ou en volume d'eau ramené au volume de sol total. La première est la teneur en eau massique, la seconde est la teneur en eau volumique.

$$w = \frac{M_E}{M_S}$$

A – Teneur en eau massique

 $\theta = \frac{V_{E}}{V_{tot.}}$ B – Teneur en eau volumique

équation 5 – Teneur en eau volumique et massique du sol.

Avec w [M.M⁻¹] ou (kg.kg⁻¹) la teneur en eau massique ; θ [L³.L⁻³] ou (m³.m⁻³) la teneur en eau volumique ; Comme la masse volumique de l'eau ρ_E a une valeur de 998,2071 kg.m⁻³ à 20°C, le volume d'eau est généralement estimé par pesée, avec $V_E = M_E / \rho_E \approx M_E / 1000$. Voir plus haut pour la définition des autres variables.

La teneur en eau volumique est généralement préférée à la teneur en eau massique. L'estimation de la teneur en eau massique est cependant plus simple à réaliser, car elle ne demande pas un prélèvement non perturbé de volume connu. L'utilisation de la teneur en eau massique peut aussi se justifier pour des mesures portant sur du sol remanié (tamisé par exemple).

En combinant l'équation 2 et l'équation 5 on obtient une équation liant la teneur en eau massique, la teneur en eau volumique et la densité apparente :

J. Moeys | Partie I

$$\theta = w \cdot \rho_{app}$$

équation 6 – Relation entre teneur en eau massique, teneur en eau volumique et masse volumique apparente.

Un sol ayant une masse volumique apparente de $1,2 \text{ g.cm}^{-3}$ aura donc une teneur en eau volumique égale à 1,2 fois sa teneur en eau massique.

L'équation 5 permet aussi, connaissant la teneur en eau massique d'un sol ou d'un échantillon, de passer de la masse 'équivalent sol sec' à sa masse humide et *vice versa* :

$$M_{tot} = M_{s}.(w+1)$$
 et $M_{s} = \frac{M_{tot}}{w+1}$

équation 7 – Conversions de la masse 'équivalent sol sec' (M_s) à la masse de sol humide (M_{tot}) ou de M_{tot} vers M_s .

Teneur en eau et potentiel matriciel

L'eau présente dans le sol n'est pas seulement caractérisée par son abondance relative. Quand le sol n'est pas à l'état de saturation, l'eau du sol n'occupe qu'une partie de la porosité et des **phénomènes de tension superficielle** ont lieu à l'interface solide, liquide, gaz. Cette tension superficielle se manifeste sous la forme d'une **différence de pression** entre les différentes phases¹³ (loi de Laplace-Young). Dans un milieu finement poreux comme le sol, cette tension superficielle donne lieu à des phénomènes de **capillarité** importants. L'eau présente dans un pore est soumise à une **dépression** à l'interface solide – eau – air. Si la porosité du sol est représentée de manière (très) simplifiée comme un capillaire vertical dont la base plonge dans une surface d'eau libre, la loi de Jurin permet de connaître la hauteur d'ascension de l'eau dans ce capillaire / pore. Cette hauteur d'eau a un poids qui compense la dépression créée par la tension superficielle :

$$|h| = \frac{2 \cdot \sigma \cdot \cos(\gamma)}{r \cdot \rho_w \cdot g} = \frac{2 \cdot 2,78 \cdot 10^{-2} \cdot 1}{r \cdot 998,2071 \cdot 9,81} \approx \frac{0,000015}{r}$$

équation 8 – Application de la loi de Jurin à l'ascension de l'eau dans un pore.

Avec h [L] ou (m) la hauteur d'eau dans le capillaire / pore ; σ [M.T⁻²], (N.m⁻¹) ou (kg.s⁻²) la tension superficielle de l'eau (égale à 2,78.10⁻² kg.s⁻² à 20°C et à pression atmosphérique) ; γ l'angle de contact entre l'interface liquide-gaz et l'interface liquide-solide (considéré arbitrairement comme égal à 0) ; ρ_w [M.L⁻³] ou (kg.m⁻³) la masse volumique de l'eau (égale à 998,2071 kg.m⁻³ à 20°C) ; g [L.T⁻²] ou (m.s⁻²) l'accélération de la pesanteur (égale à 9,81 m.s⁻²) ; r [L] ou (m) le rayon du pore / capillaire considéré. D'après Kutílek et Nielsen (1994).

Si la loi de Jurin est une approximation de ce qui se passe réellement dans le sol, elle illustre le fait que **l'eau du sol est en dépression**, du fait des forces capillaires. A une échelle plus large que le capillaire ou le pore, la somme des effets de la capillarité est appelée **potentiel matriciel du sol**. Le potentiel matriciel peut être exprimé en **unité de pression** ($Pa \sim N.m^{-2}$), il est alors symbolisé par la <u>lettre minuscule ψ </u>. Il est aussi souvent exprimé en **hauteur d'eau équivalente** et est alors symbolisé par la <u>lettre minuscule h</u>. Une autre formulation explicite du potentiel matriciel est le **rayon de pore équivalent**, qui exprime le plus grand rayon de pore (cylindrique, rectiligne) rempli de solution dans le sol si celui-ci est considéré comme un ensemble de capillaires de même taille. Le rayon de pore équivalent est calculé avec l'équation 8 :

¹³ Elle varie selon le/les rayon(s) de courbure (ou l'angle de contact) à l'interface entre deux phases.

r = 0,000015/|h| (r et h exprimés en m), ou r = 0,15/|h| (r et h exprimés en cm).

En simplifiant quelque peu les phénomènes qui ont lieu dans la porosité du sol¹⁴, et en considérant le sol comme un milieu rigide, **on considère généralement qu'à une teneur en eau donnée correspond un potentiel matriciel**, et donc qu'il existe une relation directe entre ces deux grandeurs.

La **conversion** d'une hauteur d'eau équivalente en pression se fait en suivant l'équation suivante :

$$\psi = h.g.\rho_{u}$$

équation 9 – Conversion d'une hauteur équivalente à une pression.

Avec ψ [M.L⁻¹.T⁻²], (kg.m⁻¹.s⁻²) ou (Pa) le potentiel exprimé en unité de pression ; h [L] ou (m) la hauteur d'eau équivalente ; g [L.T⁻²] ou (m.s⁻²) l'accélération de la pesanteur (égale à 9,81 m.s⁻²) ; ρ_w [M.L⁻³] ou (kg.m⁻³) la masse volumique de l'eau.

Le potentiel hydrique 'total' du sol ne dépend pas uniquement des effets capillaires. L'eau du sol est aussi soumise à la gravité, à une pression d'origine osmotique, à la pression de l'air dans les pores et à la pression des couches géologiques ou pédologiques (Kutílek et Nielsen, 1994). Mais, sauf cas particuliers, seuls le potentiel capillaire et le potentiel gravitaire sont généralement pris en compte, on définit alors :

$$\Psi = \psi_{capillaire} + \psi_{gravitaire}$$
 ou $H = h_{capillaire} + h_{gravitaire}$

équation 10 – Potentiel hydrique total du sol (*expression simplifiée*).

Avec ψ [M.L.T⁻²] et H [L] deux expressions du potentiel total; $\psi_{\text{capillaire}}$ [M.L.T⁻²] et h_{capillaire} [L] le potentiel matriciel ; $\psi_{\text{gravitaire}}$ [M.L.T⁻²] et h_{gravitaire} [L] le potentiel gravitaire.

Les variations de potentiel matriciel pouvant s'étaler sur plusieurs ordres de grandeur dans les sols (e.g., les potentiels 'caractéristiques' : h=-3,16 m, h=-158,49 m), il est fréquemment ré-exprimé en pF, une fonction logarithmique du potentiel, ce qui permet de 'linéariser' l'expression de ces variations :

$$pF = \log_{10}(-h.100)$$
 et $h = -\frac{10^{pF}}{100}$

équation 11 - Le pF, une expression logarithmique du potentiel matriciel.

Avec h le potentiel matriciel exprimé en <u>mètres</u> ; et pF son expression logarithmique.

Les potentiels caractéristiques présentés ci-dessus deviennent ainsi égaux à pF 2,5 et pF 4,2 respectivement. Leur signification est expliquée plus loin.

Rétention en eau

La relation entre la teneur en eau volumique du sol θ et son potentiel matriciel h est fortement non-linéaire : une multiplication ou une division par 2 de θ provoque une variation d'un ordre de grandeur (multiplié ou divisé par 10) de h. Ainsi pour un sol limono-argileux, le passage d'une teneur en eau de 0,43 à 0,22 puis 0,12 m³.m⁻³ fait passer le potentiel de -1, à -10 puis -100 m (pF2, 3 et 4 respectivement ; *exemples de valeurs possibles*).

Les mesures expérimentales de la relation entre la teneur en eau et le potentiel matriciel présentent une forme à double asymptote : la teneur en eau tend vers un maximum quand le potentiel tend vers 0 et un minimum quand le potentiel est élevé (pF > 6). Les fonctions ajustées aux mesures expérimentales doivent présenter une ou plusieurs des caractéristiques suivantes : (i) reproduire correctement la courbe et ses deux asymptotes (ii) se baser sur un nombre de paramètres raisonnables, auxquels on

¹⁴ Notamment les phénomènes d'hystérésis, qui font que la relation $\theta(h)$ varie aussi selon le sens des variations de θ , si le sol est en cours d'humectation ou de dessiccation.

peut trouver une signification 'physique' (iii) établir un lien entre les propriétés de rétention en eau du sol et sa conductivité hydraulique, par l'intermédiaire de certains paramètres communs.

\Box Modèle de Brooks et Corey (1964) pour $\theta(h)$

De nombreuses fonctions ont été proposées pour la rétention en eau, qui répondent plus ou moins bien à ces critères. La plus connue est celle de van Genuchten (1980), mais seules les fonctions de Brooks et Corey (1964) et de Campbell (1974) sont présentées ici. La seconde est une simplification de la première, dont l'avantage principal est le faible nombre de paramètres.

Toutes ces méthodes utilisent la **teneur en eau volumique** (*par opposition à la teneur en eau massique*).

Le potentiel au point d'entrée d'air h_A est le potentiel en deçà duquel le sol commence à ne plus être saturé en eau, quand la phase gazeuse du sol apparaît. La teneur en eau résiduelle θ_R est la limite inférieure de la teneur en eau du sol (aux potentiels très négatifs).

L'équation de rétention en eau de Brooks et Corey exprime l'indice de saturation en eau du sol en fonction de l'inverse du rapport entre le potentiel matriciel du sol et le potentiel au point d'entrée d'air à la puissance λ .

θ_E =	$=\left(\frac{h}{h_A}\right)^{-\lambda}$	avec	$\theta_E = \frac{\theta - \theta_R}{\theta_S - \theta_R}$	quand $h < h_A$
et	$\theta = \theta_S$			quand $h_A \le h < 0$

équation 12 – Modèle de Brooks et Corey $\theta(h)$.

Avec θ_E [-] l'indice de saturation en eau ; h_A [L] ou (m) le potentiel matriciel au point d'entrée d'air ; λ [-] un paramètre de forme, l'index de distribution de la taille des pores ; θ_R [L³.L⁻³] la teneur en eau résiduelle et θ_S [L³.L⁻³] la teneur en eau à saturation du sol, quand $h \ge h_A$.

On notera que cette fonction est continue, en deux domaines, et présente une rupture de pente. La valeur de θ est fixe quand $h_A \leq h < 0$, ce qui simplifie artificiellement le comportement du sol observé au voisinage de la saturation.

\Box Modèle simplifié de Campbell (1974) pour $\theta(h)$

En 1974, Campbell propose une équation simplifiée dérivée de l'équation de Brooks et Corey (1964), dans laquelle il considère le paramètre θ_R comme nul.

Cette équation, qui ne s'applique qu'à une gamme limitée de teneurs en eau, peut se reformuler :

$$\frac{\theta}{\theta_{S}} = \left(\frac{h}{h_{A}}\right)^{-\left(\frac{1}{b}\right)} \quad \text{quand } \mathbf{h} < \mathbf{h}_{A}$$

et $\theta = \theta_{S} \quad \text{quand } \mathbf{h}_{A} \le \mathbf{h} < 0$

équation 13 – Modèle de Campbell 1974 reformulé en θ(h).

On constate que le paramètre λ de Brooks et Corey correspond à (1/b).

On constate aussi que la transformation des variables en $ln(\theta) = f(ln(h))$ permet de dériver les paramètres b et h_A par simple régression linéaire (voir l'équation 30 p. 99).

On constate que θ_{S} module la hauteur du palier sur l'axe des teneurs en eau, h_{A}

module l'amplitude de ce palier sur l'axe des potentiels et -b module la pente de décroissance des teneurs en eau pour les potentiels inférieurs à h_A .



figure 6 – Allure de la fonction de Campbell (1974) de θ en fonction de h. Les abscisses donnent h en valeur absolue, et les 2 axes sont en log₁₀-log₁₀.

□ Exemples de méthodes de mesure des paramètres

Déterminer les paramètres des fonctions décrivant la relation entre θ (volumique) et h demande de disposer de mesures simultanées des deux paramètres à différentes teneurs en eau et donc différents potentiels matriciels. Comme souvent en science du sol, il existe des méthodes de mesures en **conditions réelles**, *in situ*, et des méthodes de mesure en **conditions contrôlées de laboratoire**.

Les méthodes in situ nécessitent une **mesure simultanée et non destructive de** θ **et h**, puisqu'aucun de ces deux paramètres ne peut être contrôlé, et elles nécessitent un suivi de ces paramètres sur une période permettant de balayer une gamme convenable de valeurs de θ .

Une des méthodes les plus répandue de mesure de la **teneur en eau volumique** est la **réflectométrie dans le domaine temporel** (*en anglais*: TDR, *Time Domain Reflectometry*). La méthode consiste à mesurer le temps de transit/de retour d'une onde électromagnétique dans le sol au moyen d'un appareillage dédié, pour en déduire la constante diélectrique du sol. Cette dernière est bien corrélée à la teneur en eau du sol, et la relation entre les deux propriétés peut être calibrée de manière fiable pour un sol (ou un type de sol) donné (voir Noborio, 2001 ou Wraith *et al.*, 2005). Les sondes à neutrons ont été très employées, mais sont de moins en moins utilisées pour des raisons de contraintes de sécurité. Il faut aussi citer les méthodes géophysiques que sont la mesure de la réflectance du sol (et/ou l'utilisation d'images satellites), les méthodes basées sur la résistivité électrique, ou les méthodes capacitives (voir Or et Wraith, 2002 ou Kutílek et Nielsen, 1994).

Le potentiel du sol est mesuré in situ au moyen de céramiques poreuses reliées à

un **dispositif de mesure de la pression** (manomètre à mercure ou mécanique), l'ensemble étant appelé **tensiomètre**. Un tube fermé, rigide, rempli d'eau, et dont une des extrémités est une pièce de céramique poreuse est implanté dans le sol. Le potentiel de l'eau dans le tube s'équilibre avec celui du sol alentour par l'intermédiaire de la bougie poreuse. Un tube fin, semi-rigide et rempli d'eau sort du tube et est connecté à un dispositif de mesure de la (dé)pression, le plus simple étant un tube vertical plongeant dans un réservoir de mercure. Le poids de la colonne de mercure soulevée est alors égal au potentiel matriciel du sol *plus* la dépression induite par la différence de hauteur entre la céramique poreuse et le haut du réservoir de mercure. Cette méthode ne fonctionne que pour les potentiels faibles à modérés (de h = -1 cm à h = -10 m ; *cf.* Or et Wraith, 2002). L'utilisation de capteurs psychrométriques est une autre méthode de mesure du potentiel *in situ*.

Les méthodes en conditions contrôlées de laboratoire consistent à imposer un potentiel matriciel connu à un échantillon de sol non perturbé, puis à en mesurer la teneur en eau par double pesée (sol humide et sol séché à 105°C). Ces méthodes ont l'avantage d'avoir des conditions bien contrôlées, mais elles nécessitent le prélèvement d'un échantillon théoriquement représentatif et non-perturbé, et nécessitent d'attendre qu'un équilibre s'établisse. Ce dernier met généralement plusieurs heures (potentiels proche de 0), voir plusieurs jours à s'établir (potentiel bas). Le potentiel peut être imposé en posant les échantillons de sol sur un bac de sable fin (ou de billes de verre) dont la base est connectée à une surface d'eau libre située en dessous de la surface du sable. La différence de hauteur entre les deux surfaces détermine le potentiel imposé (valable de h = 0 à h = -1 m). Aux potentiels plus bas, il est nécessaire d'utiliser des presses à plaques ou à membranes. Ces dernières permettent d'imposer une pression connue à un échantillon de sol, pression avec laquelle le potentiel va s'équilibrer (h = -P). Il existe aussi des méthodes reposant sur l'évaporation libre à la surface d'un échantillon non perturbé et préalablement saturé. A intervalles réguliers. le poids de l'échantillon est mesuré (qui permet par la suite de connaître sa teneur en eau volumique), ainsi que le potentiel matriciel à plusieurs hauteurs (microtensiomètres). Il est nécessaire d'utiliser une méthode d'inversion numérique pour estimer les propriétés hydriques du sol (rétention en eau, mais aussi conductivité hydraulique, voir Wind, 1968 ou Tamari et al., 1993). Plus récemment une méthode basée sur le processus inverse, l'infiltration progressive d'eau dans un cylindre de sol (dont le potentiel matriciel et le poids total est contrôlé) a été mise au point et testée (Bruckler et al., 2002).

La rétention en eau et la conductivité hydraulique des sols sont notoirement affectées par la **fraction granulométrique grossière** (> 2 mm ; éléments grossiers), quand celle-ci est importante. La **nature lithologique** des éléments grossiers, l'**abondance** et la **géométrie** de leurs pores, ainsi que leur position dans le profil peut moduler l'effet de la fraction grossière sur les propriétés hydriques du sol (e.g. Cousin *et al.*, 2003, Sauer et Logson, 2002). Malgré la relative importance des sols caillouteux, *y compris en Beauce (Aillot et Verbeque, 1995) et dans le secteur agricole étudié ici,* peu d'études portent sur la prise en compte des éléments grossiers dans l'hydrologie des sols.

Ordres de grandeur, variabilité spatiale et déterminismes agro-pédologiques

Vauclin (1982) classe la teneur en eau à saturation comme faiblement variable, et les teneurs en eau à la capacité au champ et au point de flétrissement permanent comme ayant une variabilité moyenne. Les données de cette revue bibliographique comprennent des données de Cameron (1978), Nielsen *et al.* (1973) et Imbernon

(1981), et recoupent et développent la revue effectuée par Warrick et Nielsen (1980). Les valeurs obtenues par Lafrance et Banton (1995), Coquet et al. (2004), Russo et Bouton (1992) et Walker et Austin (2004) ont aussi été examinées. Ces sources permettent d'avoir un aperçu (*incomplet*) de la variabilité de la teneur en eau à saturation. Le paramètre varie entre 0,30 et 0,48 cm³.cm⁻³ (valeurs moyennes), avec une moyenne de 0,42 cm³.cm⁻³. Les coefficients de variation (CV) indiqués sont modérés, avec des valeurs entre **2,3%** et **13,6%**, sur des surfaces très variables. On note que Cameron (1978) et Nielsen *et al.* (1973) obtiennent des CV très proche (**10** et **11%**) sur des surfaces très différentes (0,02 contre 150 ha).

Russo et Bresler (1981) trouvent une distance maximale d'autocorrélation de 76 mètres pour θ_s , dans une parcelle de $80 \times 120 \text{ m}$.

Les propriétés du sol qui influencent les caractéristiques de la rétention en eau ont été utilisées dans de nombreuses fonctions de pédotransfert. Williams et al. (1992, cité par Cresswell et al., 2006), utilisent la teneur en argile, en limon et en sable fin pour prédire les paramètres h_A et b de la fonction de Campbell (1974), et la densité apparente pour prédire θ_s . La fonction de pédotransfert de Hall et al. (1977, cité par Morvan et al., 2004) utilise les mêmes paramètres, à l'exception de la teneur en sable fin, et se base aussi sur la teneur en carbone organique pour les horizons de subsurface. Bastet (1999) se base sur les mêmes paramètres, tandis que Vereecken (1989) n'utilise que les teneurs en argile, sable et carbone organique (références citées par Morvan et al. 2004). Bruand et al. (2003) proposent une approche par classe de pédotransfert reposant sur la classe de texture (5 classes, triangle FAO) et la classe de masse volumique apparente (déterminée sur mottes). Pachepsky et al. (2006) ont établi des fonctions de pédotransfert (arbres de régression) à partir de la teneur en argile du sol et de différents descripteurs de la structure du sol : sa netteté, sa taille et sa forme. Les auteurs soulignent la nécessité de mieux intégrer les descripteurs de structure dans les fonctions de pédotransfert et de développer des méthodes quantitatives de caractérisation de la structure.

L'eau du sol et la plante : notion de réserve utile

Le fait qu'il existe une relation directe – mais fortement non-linéaire – entre la teneur en eau du sol et son potentiel matriciel a une conséquence directe et mécanique pour les plantes qui prélèvent l'eau de ce sol : **plus le potentiel matriciel est bas** (négatif), **plus l'eau est** (1) **peu abondante** (2) **difficile à prélever**, et inversement aux potentiels élevés (proches de zéro).

Cependant, quand le sol est proche de la saturation, le potentiel matriciel est proche de zéro, la force exercée par la **gravité** domine et l'eau du sol s'écoule vers le bas : c'est le **drainage**. Quand le sol se rapproche de la saturation, l'eau située dans les pores les plus gros, c'est à dire l'eau la moins retenue (selon l'équation 8), s'évacue en quelques jours sous l'effet de la gravité, elle est donc peu disponible pour les plantes. Le potentiel au-dessus duquel l'eau s'écoule par gravité est appelé **capacité au champ**, il est fixé par convention à pF2 ou pF2,5, c'est à dire -10 ou -33 kPa (0,1 ou 1/3 bar)

Aux teneurs en eau très basses, quand le potentiel matriciel passe sous un certain seuil, les plantes ne sont plus capables de prélever l'eau ni de réguler leur transpiration et la plante flétrit. Ce potentiel caractéristique est appelé « **point de flétrissement permanent** ». Bien qu'il soit variable d'une plante à l'autre, il a été fixé par convention à -1550 kPa (-15,5 bars), ce qui correspond approximativement à pF4,2 (voir par ex. Kutílek et Nielsen, 1994).

La différence entre la teneur en eau à la capacité au champ (θ_{pF2}) et la teneur en eau au point de flétrissement permanent ($\theta_{pF4,2}$) donne la proportion (massique ou

volumique) d'eau <u>potentiellement</u>¹⁵ disponible pour les plantes. Dans le cas d'une plante cultivée, si on multiplie cette différence de teneurs en eau volumiques par la profondeur d'enracinement, on obtient une estimation de la **hauteur (quantité) d'eau potentiellement utilisable par la plante dans le sol** : cette hauteur d'eau est appelée **réserve utile du sol** (RU). Si l'on ne considère qu'un seul horizon de sol, colonisable sur toute son épaisseur par les racines, on peut parler de **teneur en eau utile de l'horizon**, avec $\theta_{U} = (\theta_{pE2} - \theta_{pF4,2})$ (teneurs en eau volumiques).

■ Flux et conductivité hydraulique en régime non saturé

L'eau du sol se déplaçant des zones de potentiel hydraulique plus élevé vers les zones de potentiel plus bas, toute différence de potentiel hydraulique engendre une redistribution d'eau, c'est à dire un flux. Ce flux varie en fonction de la différence de potentiel.

$$q = -K(h) \cdot \frac{dH}{dz}$$
 ou $\vec{q} = -K(h) \cdot \nabla \vec{H}$

équation 14 – Flux en régime non saturé monodimensionnel ou tridimensionnel, d'après la loi de Buckingham-Darcy.

La première équation est de forme monodimensionnelle, la seconde est de forme multidimensionnelle. Avec q la densité de flux $[L.T^{-1}]$ ou $(m.s^{-1})$; K(h) $[L.T^{-1}]$ la conductivité hydraulique au potentiel h ; dH/dz [-] la dérivée partielle du potentiel hydraulique total H par rapport à la distance z, au point considéré ; \vec{q} la densité de flux ; $\nabla \vec{H}$ le gradient de potentiel H au point considéré.

L'équation 14 est une forme généralisée de l'équation du flux en régime saturé (Darcy, 1856), formulée par Buckingham (1907), et dite loi de Buckingham-Darcy. Elle montre que le flux d'eau engendré par un gradient de potentiel $\nabla \vec{H}$ est proportionnel à K(h), conductivité hydraulique du sol au potentiel h (potentiel hydrique du sol au point considéré).

Cette équation permet de décrire le transfert de l'eau liquide dans les sols saturés et non saturés, **en condition de régime permanent**, c'est à dire dont les variables d'état (flux, potentiel, teneur en eau) ne changent pas au cours du temps. Cette condition est rarement rencontrée en réalité, car les flux, les teneurs en eau et les potentiels matriciels varient généralement au cours du temps. L'adaptation de l'équation de Buckingham-Darcy au régime transitoire (équation de Richards, 1931), et ses solutions analytiques – importantes en modélisation – sont hors du contexte de ce document et <u>ne sont pas présentées ici</u>.

La relation entre le potentiel matriciel h du sol et sa conductivité hydraulique K est, elle aussi, fortement non-linéaire : une variation d'un ordre de grandeur de h divise ou multiplie par 1000 la valeur de K. Ainsi, pour un sol limono-argileux, le passage d'un potentiel de -1, à -10 puis à un potentiel de -100 m (pF 2, 3 et 4 respectivement) fait passer la conductivité de $1,3.10^{-1}$ à $1,5.10^{-4}$ puis $9,2.10^{-8} \text{ m.s}^{-1}$ (exemples de valeurs).

Comme pour la relation entre θ et h, plusieurs fonctions ont été proposées pour décrire la relation entre K et h. L'une des plus populaires est celle de van Genuchten (1980), mais seuls les modèles de Brooks et Corey (1964) et sa simplification par Campbell (1974) sont présentés ici. Ces deux modèles, comme celui de van Genuchten 1980, utilisent des paramètres communs entre les fonctions $\theta(h)$ et les fonctions K(h), établissant ainsi un lien entre ces 3 propriétés fondamentales pour la

¹⁵ Il s'agit d'une quantité 'potentielle' et non d'une 'réserve réelle'. La quantité d'eau dans le sol fluctue au cours de la saison culturale, selon la météo et les prélèvements racinaires par les plantes.

description des processus hydrologiques dans les sols.

Modèle de Brooks et Corey pour K(h) П

L'équation de conductivité hydraulique de Brooks et Corey (1964) exprime le rapport entre la conductivité hydraulique à un potentiel h et la conductivité hydraulique à saturation en fonction de l'inverse du rapport entre le potentiel h et le potentiel au point d'entrée d'air élevé à la puissance m.

$$\frac{K}{K_{S}} = \left(\frac{h}{h_{A}}\right)^{-m} \quad \text{quand } \mathbf{h} < \mathbf{h}_{A}$$

et $K = K_{S} \quad \text{quand } \mathbf{h}_{A} \le \mathbf{h} < 0$

équation 15 Modèle de Brooks et Corey de K en fonction de h.

Avec K_S [L.T⁻¹] ou (m.s⁻¹) la conductivité hydraulique du sol à saturation ; h_A [L] ou (m) le potentiel matriciel au point d'entrée d'air; m [-] un paramètre de forme dépendant de la distribution de taille de pores.

Modèle de Campbell (1974) pour K(h)





La fonction de conductivité hydraulique s'écrit :

$$K = K_{S} \cdot \left(\frac{\theta}{\theta_{S}}\right)^{(2b+3)}$$

équation 16 – Modèle de Campbell (1974) de K en fonction de θ.

Avec $K_s [L.T^{-1}]$ ou (m.s⁻¹) la conductivité hydraulique du sol à saturation ; $\theta_s [M.L^{-3}]$ ou (kg.m⁻³) la teneur en volumique eau à saturation ; b [-] le paramètre de forme qui apparaît aussi dans la fonction $\theta(h)$ (équation 13).

Avec l'équation 13, on peut reformuler le modèle de manière à exprimer K en fonction de h, ce qui donne :

$$\frac{K}{K_{S}} = \left(\frac{h}{h_{A}}\right)^{-\left(2+\frac{3}{b}\right)} \quad \text{quand } h < h_{A}$$

et $K = K_{S} \quad \text{quand } h_{A} \le h < 0$

équation 17 – Modèle de Campbell (1974) de K en fonction de h (reformulé).

On voit que le paramètre m de Brooks et Corey est égal à 2+3/b, et que les deux modèles sont équivalents.

On constate que K_s module la hauteur du palier sur l'axe des conductivités, h_A module l'amplitude de ce palier sur l'axe des potentiels et -(2+3/b) module la pente de décroissance des conductivités pour les potentiels inférieurs à h_A .

□ Aperçu des méthodes de mesure des paramètres

Les méthodes de détermination de la conductivité hydraulique (saturée ou non) et des paramètres des fonctions K(h) sont nombreuses et de natures diverses. Comme pour les paramètres de la rétention en eau, la détermination peut se faire *in situ* ou dans des conditions contrôlées de laboratoire. Ces méthodes reposent sur la détermination simultanée des valeurs de K et de h. Le plus souvent, h est connu et imposé.

Le suivi des valeurs $\theta(h)$ *in situ* à l'aide de tensiomètres céramiques et de sondes TDR, présenté plus haut, accompagné d'un suivi de la pluviométrie et de l'évapotranspiration potentielle, permet aussi de déterminer les paramètres de la fonction K(h) par modélisation inverse. La modélisation inverse consiste à rechercher les paramètres des fonctions $\theta(h)$ et K(h) qui permettent de reproduire au mieux les valeurs observées à l'aide d'un modèle numérique des flux d'eau dans le sol (e.g. Junior *et al.*, 2007 ; Bouraoui, 2007 ; Sheikh et van Loon, 2007).

Les méthodes d'infiltrométrie, sous charge, à saturation ou en régime non saturé, permettent de réaliser des mesures plus nombreuses et sur des secteurs plus importants. Les méthodes d'infiltrométrie consistent à infiltrer localement (*sur une aire bien délimitée*) de l'eau depuis la surface du sol, en imposant une charge ou une dépression. Les perméamètres réalisent une infiltration sous une charge faible, tandis que les infiltromètres réalisent une infiltration sous succion. Les deux méthodes sont limitées aux potentiels proches de la saturation (-15 < h < 10 cm), et contrôlent le potentiel imposé par un dispositif appelé **vase de Mariotte**. L'interprétation des mesures d'infiltration en surface du sol, et les calculs de K(h) qui en découlent, sont notamment basés sur l'équation de Wooding (1968 ; équation 32, p. 105), solution de l'équation de Richards pour les **infiltrations axisymétriques à partir d'un disque** de rayon r, et de développements apportés par Philip (voir Radcliffe et Rasmussen, 2002).

Les types de perméamètres et d'infiltromètres sont nombreux (e.g. perméamètre de Guelph, Radcliffe et Rasmussen, 2002 ou Angulo-Jaramillo *et al.*, 2000) et continuent de se développer (*e.g.* infiltromètre de Hood : Schwärzel et Punzel, 2007). **Certaines méthodes d'infiltrométrie monopotentiel non-saturée sont décrites plus en détail dans les matériels et méthodes** (p. 100). Il faut aussi citer le développement de méthodes d'infiltration sous faible charge par apport d'eau à la surface du sol dans un 'anneau' simple ou double, comme la méthodes de détermination des paramètres de la conductivité hydraulique par 'inversion' de modèles hydriques sur des données d'infiltration ont aussi été développées (Šimůnek *et al.*, 1998).

Les méthodes de détermination de la conductivité hydraulique en **conditions contrôlées de laboratoire** permettent un meilleur contrôle des conditions de potentiel, mais supposent que l'on puisse prélever des échantillons de sol non perturbés et représentatifs. La détermination de la **conductivité hydraulique à saturation** (K_{SAT}) repose sur des bases théoriques plus simples que les méthodes *in situ*, car elle repose sur l'équation de Darcy en milieu saturé. En pratique, on fait circuler de l'eau dans un échantillon de sol, de haut en bas ou de bas en haut, en contrôlant la charge (h > 0) qui est imposée. L'application de plusieurs charges et la mesure des débits de sortie qui en résultent permet de déterminer K_{SAT} (voir Klute, 1965 ou Stolte, 1997). Les méthodes de suivi de l'évaporation ou de l'infiltration à la surface d'un échantillon de sol, présentées pour la détermination des paramètres de la conductivité hydraulique. Enfin, l'inversion numérique de données d'infiltration, d'élution, de tensiomètrie et de teneurs en eau obtenues par sondes TDR, obtenues sur des colonnes de sol.

Ordres de grandeur, variabilité spatiale et déterminismes agro-pédologiques

La conductivité hydraulique à saturation est un paramètre essentiel pour comprendre le comportement hydrique des sols, mais il est (i) difficile à mesurer avec précision, (ii) sa distribution s'écarte généralement fortement d'une loi normale (Vauclin, 1982, Angulo-Jaramillo *et al.*, 2000) et (iii) sa variabilité spatiale est grande (*ibid.*).

Les revues de Warrick (1980) et de Vauclin (1982) présentent des valeurs de K_{SAT} issues de diverses études (Gumaa, 1978; Nielsen et al., 1973; Russo et Bresler, 1981) dont les valeurs moyennes vont de 2,31.10⁻³ mm.s⁻¹ à 4,44.10⁻² mm.s⁻¹, avec des coefficients de variation (CV) compris entre 36 % et 183 %, sur des surfaces de 0,8, 15 et 150 ha. Mulla et McBratney (2002) indiquent dans leur revue que le CV du K_{SAT} varie de 48 à 352 %. Clothier et Smetten (1990) mesurent un K_{SAT} moyen sur deux profils de 6.10⁻² mm.s⁻¹ à 6,3.10⁻² mm.s⁻¹. Lafrance et Banton (1995) obtiennent un K_{SAT} moyen de $3,08.10^{-2}$ mm.s⁻¹ et un CV de **271 %** sur 1,5 ha. Bosh et West (1998) mesurent un K_{SAT} moyen de 1,83.10⁻¹ mm.s⁻¹ avec un CV de **32 %** (n=18 mesures). Sur différentes zones d'un profil cultural, Coquet et al. 2001 mesurent des K_{SAT} compris entre 1,36.10⁻² mm.s⁻¹ et $1,17.10^{-1}$ mm.s⁻¹, avec une conductivité croissante depuis les mottes Δ et les passages de roue, les mottes Γ , le sol sous l'horizon travaillé, jusqu'au lit de semence. Enfin, à des échelles nationales, Nemes et al. (2005) montrent que les conductivités hydrauliques à saturation moyennes des bases de données européenne, hongroise et nord-américaine sont respectivement de 1,50.10⁻², 9,10.10⁻³ et 2,04.10⁻³ mm.s⁻¹, avec des coefficients de variation de 227 %, 172 % et 153 %.

Sur le même secteur agricole que celui étudié ici (Ouarville), Coquet *et al.* (2005*b*) trouvent un coefficient de variation de K_{SAT} de **226 %** sur différents horizons de 3

fosses pédologiques. Sur les horizons de surface de 4 autres fosses, situées dans une même parcelle¹⁶ du secteur de Ouarville, Coquet *et al.* (2006) (*mesures INRA d'Orléans / I. Cousin*) ont déterminé des conductivités hydrauliques avec la méthode de Wind (1968) : les valeurs s'étalent de $6,28.10^{-3}$ mm.s⁻¹ à $1,17.10^{-1}$ mm.s⁻¹ (n=14). Sur un transect réalisé dans la même parcelle, Coquet *et al.* (2006) (*mesures LTHE / R. Angulo-Jaramillo*) ont déterminé des conductivités hydrauliques par la méthode 'Beerkan' : dans l'inter-rang du blé, le K_{SAT} va de $7,74.10^{-4}$ à $5,22.10^{-2}$ mm.s⁻¹, avec une moyenne de $1,36.10^{-2}$ mm.s⁻¹ et un CV de **95 %** (n = 24).

Mulla et McBratney (2002) classent la portée du variogramme de la conductivité hydraulique à saturation **entre 1 et 34 mètres**. Vauclin (1982), analysant 5 publications indique que la conductivité hydraulique à saturation a une portée ou une distance d'autocorrélation comprise **entre 2,5 et 50 mètres**, avec une référence pour laquelle la portée est inférieure à deux mètres (effet pépite). Russo et Bouton (1992) mesurent des distances d'autocorrélations de **0,8 m**, et citent les travaux de Byers et Stephens (1983) et de Sudicky (1986) qui trouvent une distance d'autocorrélation entre **0,6 et 2,8 m**. Logsdon et Janes (1996) trouvent une autocorrélation de K_{SAT} sur **0,6-0,8 m**.

■ La sorptivité

La sorptivité S [L.T^{-1/2}] est un paramètre du sol qui reflète **sa capacité à absorber** l'eau par capillarité, en fonction des teneurs en eau (et donc du potentiel) initiales et finales lors d'un apport d'eau (comme c'est le cas lors d'une infiltration). Le paramètre est exprimé en unité de longueur par unité de temps exprimée en \sqrt{T} . En l'absence d'effets de la gravité sur l'infiltration d'eau dans le sol (ce qui est approximativement le cas au début de cette dernière) la quantité d'eau infiltrée dans le sol est fonction de la sorptivité et de la racine carrée du temps (*cf. équation 37, p. 107*), ce qui traduit un ralentissement progressif des effets de la capillarité en fonction du temps.

La sorptivité S est un paramètre essentiel pour la description de l'infiltration de l'eau dans le sol, comme la conductivité hydraulique K(h). La sorptivité reflète les effets de la capillarité sur l'infiltration, tandis que la conductivité reflète les effets de la gravité, pour une différence de potentiel donné (cf. « *Détermination des paramètres de la conductivité hydraulique in situ* », p. 100).

■ 2.3 Transport de soluté

Cette partie vise à présenter les équations physiques qui décrivent les processus de transport de soluté dans l'eau du sol. Ces équations sont regroupées sous le terme d'équations de convection-dispersion, dont les variantes dépendent des processus qui sont pris en compte (convection, diffusion, dispersion, adsorption...) et du nombre de dimensions de l'espace considérées (monodimensionnel vertical ou tridimensionnel). Ces équations sont importantes pour décrire et mesurer les processus qui aboutissent à des flux d'eau préférentiels, c'est à dire des flux de soluté qui ne sont pas expliqués par les équations décrivant les mouvements d'eau dans le sol (présentées plus haut).

■ Équation de convection-dispersion

En l'absence de tout phénomène de dispersion ou de diffusion, tout déplacement d'eau dans le sol induit un déplacement de soluté par **convection**. A un endroit donné du sol, la variation de masse du soluté est égale à la quantité de soluté exportée par le

¹⁶ Parcelle étudiée par Alletto (2004), Moeys (2004), Moeys *et al.* (2006) et Millot (2004).

flux d'eau. Mais le sol est un milieu complexe et sa porosité un réseau tortueux qui induit une dispersion des molécules en solution : (1) dispersion du fait du gradient de vélocité de l'eau dans chaque pore (vélocité maximale au centre), (2) dispersion du fait de flux différents dans les pores de tailles différentes, (3) dispersion du fait de directions de flux inégales et enfin (4) dispersion du fait de trajets de longueur variable pour parcourir une 'distance' de point à point similaire. Lorsque des différences de concentration en soluté existent dans le sol, des phénomènes de **diffusion** se mettent en œuvre pour rééquilibrer les concentrations dans la solution du sol.

Diffusion et dispersion ayant des effets similaires et difficiles à séparer, les deux phénomènes sont résumés par un seul est même paramètre, le coefficient de dispersion hydrodynamique.

Les phénomènes de convection et de dispersion-diffusion sont rassemblés dans une même équation de conservation de la masse, équation aux dérivées partielles qui exprime la variation de masse de soluté par rapport au temps en fonction de la variation dans l'espace du flux convectif de soluté auquel on ajoute les effets de la dispersion. Une fonction additionnelle 'puits' ou 'source' de soluté permet de prendre en compte les phénomènes connexes de prélèvement de soluté (par les plantes), ou de dégradation.

$$\frac{\partial(\theta, C)}{\partial t} = \frac{-\partial}{\partial x} \left(J_E, C - \theta, D, \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \theta R_S \quad \text{avec} \quad D = D_{dis} + D_{dif}$$

équation 18 – Équation de conservation de la masse pour un flux de soluté convectif et dispersif, monodimensionnel, en régime transitoire.

Avec θ [L³.L⁻³] ou (m³.m⁻³) la teneur en eau volumique ; C [M.L⁻³] ou (kg.m⁻³) la concentration du soluté dans la phase liquide du sol ; t le temps (s⁻¹) ; x [L] ou (m) la dimension de l'espace considérée, généralement la profondeur depuis la surface du sol ; J_E [L.T⁻¹] ou (m.s⁻¹) la densité de flux de l'eau ; D [L².T⁻¹] ou (m².s⁻¹) le coefficient de dispersion hydrodynamique, qui regroupe la dispersion 'mécanique' (D_{dis.}) et la dispersion par diffusion (D_{dif.}) ; R_s [M.L⁻³.T⁻¹] ou (kg.m⁻³.s⁻¹) est une fonction 'puits' d'exportation du soluté, éventuellement égale à la somme de plusieurs phénomènes d'exportation ou transformation du soluté. D'après Leij et van Genuchten (2002).

Si l'on se place dans le cas d'un régime permanent (θ , h et donc flux constant), l'équation est remplacée par la suivante :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \cdot \frac{\partial C}{\partial x} + R_s \quad \text{avec} \quad v = \frac{J_E}{\theta}$$

équation 19 – Équation de conservation de la masse pour un flux de soluté convectif et dispersif, monodimensionnel, en régime permanent.

Avec v $[L.T^{-1}]$ ou $(m.s^{-1})$ la vélocité de l'eau dans la porosité du sol. D'après Leij et van Genuchten (2002).

Dans le cas simple d'un soluté qui s'adsorbe sur la phase solide du sol, avec un équilibre instantané et une adsorption linéaire, on a l'équation suivante :

$$RF \cdot \frac{\partial C}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \cdot \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{R_s}{\theta} \quad \text{avec} \quad RF = 1 + \frac{\rho_s}{\theta} \cdot K_D$$

équation 20 – Équation de conservation de la masse pour un flux convectif et dispersif de soluté adsorbé, monodimensionnel, en régime permanent.

Avec RF [-] le facteur de retardement (*en anglais: Retardation Factor*). Cette équation n'est valable que pour une adsorption linéaire avec un équilibre instantané. D'après Leij et van Genuchten (2002) et Kutílek et Nielsen (1994).

J. Moeys Partie I

Le facteur de retardement introduit dans cette équation illustre le retard du flux de soluté induit par son adsorption sur la phase solide du sol. Le facteur de retardement est notoirement utilisé dans la formulation de l'indicateur de Rao et Hornsby (1985), AF/RF (*en anglais* : *Attenuation Factor / Retardation Factor*), où le temps de demi-vie de dégradation de la molécule joue comme un atténuateur de sa présence et l'adsorption retarde son transfert.

Les équations du transport convectif-dispersif présentées ci-dessus considèrent que le sol est homogène : il n'existe pas de différences internes de teneur en eau ou de potentiel.

■ Flux préférentiels

Les études de dissipation des pesticides à l'échelle parcellaire ont montré que, <u>dans</u> <u>certains cas</u>, le facteur 'atténuation' présenté ci-dessus ne semblait pas pertinent, dans la mesure où des pesticides présentant des coefficients d'adsorption contrastés atteignaient en même temps la base du sol (*pour une revue, voir Flury, 1996*). Si la proportion totale de pesticide lixiviée est bien corrélée à ses propriétés d'adsorption et de dégradation, la temporalité de certains flux d'eau et de pesticides est en désaccord avec les équations du transport de l'eau.

Ces flux rapides et 'non-expliqués' par les théories classiques du transport d'eau et des solutés sont appelés **flux préférentiels**. L'explication généralement donnée est l'absence d'équilibre / d'homogénéité dans la porosité du sol. Le sol a une teneur en eau et un potentiel global, mais il subsiste localement des différences, notamment liées aux variations locales de porosité, ou de propriétés du sol (hydrophobicité). Cette absence d'équilibre affecte la circulation de l'eau dans le sol, qui peut très localement s'avérer plus rapide que le mouvement global prévu par les fonctions $\theta(h)$ et K(h).

Si l'on se réfère à Šimůnek *et al.* (2003), l'une des caractéristiques des flux préférentiels est que « durant une phase d'humectation, une partie du front d'humectation peut se propager rapidement à une profondeur significative, en courtcircuitant une large partie de l'espace poral de la matrice [du sol] ».

Les flux préférentiels sont en fait de nature variée. Radcliffe et Rasmussen (2002) classent les modèles de flux préférentiels en 3 catégories :

- (i) Les flux préférentiels liés à la présence de macropores qui conduisent les flux d'eau plus rapidement que la matrice lorsqu'ils sont saturés ;
- (ii) Les flux préférentiels liés aux contrastes de texture entre deux couches de sol (horizon à granulométrie fine sur horizon à granulométrie plus grossière), ce qui engendre un contraste de potentiel lors de l'infiltration, engendrant à son tour des instabilités locales qui aboutissent à une infiltration par digitation dans l'horizon à granulométrie grossière (*en anglais : fingering*);
- (iii) Les flux préférentiels liés à des contrastes de texture internes aux horizons de sol ou aux matériaux de la zone non-saturée qui induisent des flux plus réduits dans les zones de granulométrie plus grossière (*en anglais : funneling*).

La première catégorie peut être généralisée par les concepts de multi-porosité / multi-perméabilité qui sous tendent de nombreux modèles physiques de flux préférentiels. Le concept de double porosité peut par exemple refléter la présence de macropores, dans le sens pédologique (pores les plus larges, fissures et conduits de vers de terre...), au côté d'une porosité matricielle plus fine, mais n'est pas limité à ce seul concept.

Une autre conséquence des flux préférentiels en 'non-équilibre', soulignée par

Šimůnek *et al.* (2003), est le comportement encore moins 'linéaire' des flux d'eau et de solutés au voisinage de la saturation (*les fonctions K*(*h*) *'classiques' induisant déjà une non-linéarité des flux...*).

C'est un des modèles les plus simples qui a été utilisé dans l'étude présentée ici, le modèle à double porosité – double perméabilité eau mobile / eau immobile.

□ *Le modèle 'eau mobile / eau immobile' (MIM)*

En 1964, Coats et Smith proposent un modèle simple pour expliquer les observations de transferts rapides de soluté. La porosité du sol se divise en deux compartiments. Tandis que l'eau située dans le premier compartiment est mobile ('eau mobile'), comme dans le modèle classique de Darcy, l'eau située dans le deuxième compartiment est immobile ('eau immobile'). Les flux d'eau n'existent pas dans le second compartiment (ni vers d'autres couches de sol, ni vers le compartiment mobile), mais les compartiments mobiles et immobiles peuvent échanger des solutés par diffusion. Le modèle est élaboré pour un flux en régime permanent, donc ni θ , ni h ne changent au cours du temps.

La figure 8 illustre le principe du modèle d'eau mobile / eau immobile, dit modèle MIM. La partition de la phase liquide est illustrée par l'équation 21.

$$\theta = \theta_{mob.} + \theta_{imm}$$

équation 21 – Séparation de la phase liquide du sol en un compartiment mobile et un compartiment immobile.

Avec θ la teneur en eau du sol [L³.L⁻³] ou (m³.m⁻³), à un potentiel donné ; $\theta_{mob.}$ la teneur en eau mobile et $\theta_{imm.}$ la teneur en eau immobile.

Ce modèle est la version la plus simple du mobile MIM. La teneur en eau, le potentiel et la teneur en eau immobile sont fixes, et seuls les transferts de soluté entre la phase mobile et la phase immobile sont décrits. Pour une épaisseur de sol donnée, le bilan de masse des solutés est le suivant :

$$M_{s,totale} = M_{s,mob.} + M_{s,imm.}$$

$$C_{s,globale} \cdot \theta = C_{s,mob.} \cdot \theta_{mob.} + C_{s,imm.} \cdot \theta_{imm.}$$

équation 22 – Bilan de masse de soluté dans les parties mobile et immobile de la phase liquide du sol.

Avec S le soluté considéré ; $M_{S,totale}$ [M] ou (kg) la masse totale de soluté dans la phase liquide; $M_{S,mob.}$ la masse de soluté dans la phase mobile ; $M_{S,imm.}$ la masse de soluté dans la phase immobile du sol ; Comme la masse est égale à la concentration fois le volume, on obtient la 2^e équation, avec $C_{S,globale}$ [M.L⁻³] ou (kg.m⁻³) la concentration en soluté globale, dans la phase liquide ; $C_{S,mob.}$ la concentration en soluté dans la phase mobile du sol ; $C_{S,imm.}$ la concentration en soluté dans la phase mobile du sol ; $C_{S,imm.}$ la concentration en soluté dans la phase mobile du sol ; $C_{S,imm.}$ la concentration en soluté dans la phase mobile.

Cette équation permet notamment de déduire la teneur en eau immobile à partir d'expériences d'infiltration avec un traceur inerte (voir les matériels et méthodes, p. 120).

J. Moeys | Partie I

Lorsque l'on considère une phase liquide en mouvement, sur un axe vertical (monodimensionnel) et en régime hydrodynamique permanent, la concentration en soluté à la profondeur z et au temps t est décrite par les équations aux dérivées partielles suivantes :

$$\theta_{mob.} \cdot \frac{\partial C_{mob.}}{\partial t} + \theta_{imm.} \cdot \frac{\partial C_{imm.}}{\partial t} = \theta_{mob.} \cdot D_{imm.} \cdot \frac{\partial^2 C_{mob.}}{\partial z^2} - q \cdot \frac{\partial C_{mob.}}{\partial z}$$
$$\theta_{imm.} \cdot \frac{\partial C_{imm.}}{\partial t} = \alpha \cdot (C_{mob.} - C_{imm.})$$

avec

équation 23 – Équations aux dérivées partielles des teneurs en eau mobile et immobile et de leurs concentrations en soluté.

Avec z [L] ou (m) la profondeur ; t [T] ou (s) le temps ; D le coefficient de dispersion $[L^2.T^{-1}]$ ou $(m^2.s^{-1})$ du soluté dans la phase mobile et α le coefficient de diffusion (d'échange) $[T^{-1}]$ ou (s^{-1}) du soluté entre la partie mobile et la partie immobile.

Le modèle MIM présenté ci-dessus ne comprend pas explicitement de termes décrivant une éventuelle variation de la teneur en eau 'apparemment' immobile en fonction du potentiel h. Or il paraît évident que la fraction d'eau dite immobile peut parfois évoluer avec les variations de teneur en eau, notamment si la fraction d'eau immobile est importante : lorsque le sol sèche, la teneur en eau du sol peut parfois être inférieure à la teneur en eau immobile mesurée à saturation. Pour ces raisons, il est important de comparer des fractions d'eau immobile en tenant compte du potentiel auquel elles ont été mesurées.



figure 8 – Schéma du modèle eau mobile – eau immobile.

Ordres de grandeur, variabilité spatiale et déterminismes agro-pédologiques

Clothier *et al.* (1992) ont mesuré une fraction d'eau immobile de **49**%, pour h = -3 cm. Clothier *et al.* (1995) ont mesuré une fraction d'eau immobile égale à **36**% pour h = -1,5 cm. Angulo-Jaramillo *et al.* (1996) ont mesuré une fraction d'eau immobile de **63,5**% pour h = 0 cm. Sur le même site, ainsi que sur un second site distant du premier, Angulo-Jaramillo *et al.* (1997) ont mesuré une fraction d'eau immobile de **76**% et de **38**% (h = -3 cm). Pour le premier site, la fraction d'eau immobile baisse entre la période d'émergence de la culture et sa récolte. Casey *et al.* (1997) ont mesuré une fraction d'eau immobile baisse entre la période d'émergence de la culture et sa récolte. Casey *et al.* (1997) ont mesuré une fraction d'eau immobile variant entre **39,4**% et **95,2**% (n = 47; h = -3 cm).

Sur la parcelle d'étude située dans le même secteur agricole que l'étude présentée

ici, Alletto *et al.* (2006*b*) mesurent des fractions d'eau immobile variant entre **21,3** % et **88,2** % (n = 8; h = -1 cm), avec une des 3 fosses pédologiques étudiées présentant une fraction d'eau immobile plus basse. La fraction d'eau immobile moyenne entre les 3 fosses est de **53,3** %. Sur la même parcelle, Millot (2004) a mesuré des fractions d'eau immobile variant entre **0** et **93** % et entre **0** et **96** %, et de **53,3** % en moyenne sur deux transects emboîtés (n = 19 et 24; h = -1 cm), dans un alignement parallèle à celui des 3 fosses caractérisées par Alletto *et al.* (2006*b*). Köhne *et al.* (2004) ont estimé par inversion les paramètres de deux modèles de teneur en eau immobile complexes, à 8 et 10 paramètres, sur des colonnes de sol. Ils mesurent une fraction d'eau immobile à saturation (h = 0 cm) entre **59** et **89** %.

Alletto *et al.* (2006*b*) ont évalué que, sur la parcelle étudiée (Ouarville), les effets de la diffusion (α) entre la fraction mobile et la fraction immobile pouvaient être négligés lors d'une mesure de la fraction d'eau immobile au voisinage de la saturation. Ils mesurent une valeur de α entre 0,0006 to 0.0115 h⁻¹. Ces valeurs apparaissent relativement faibles au regard d'autres études que les auteurs citent (α entre 0,008 et 0,3 h⁻¹).

Sur un transect de 58 m, avec 47 mesures, Casey *et al.* (1997) n'ont pas réussi à mettre en évidence de structure spatiale de la fraction d'eau immobile ou du coefficient d'échange α , malgré un espacement entre les mesures un peu supérieur à 1 m. Millot (2004) a identifié une longueur caractéristique de corrélation de 88 m, pour des mesures de fraction d'eau immobile espacées de 40 m.

2.4 Processus physiques, chimiques et biologiques subis par les produits phytosanitaires

Les pesticides ne sont pas des molécules chimiquement inertes. Elles **interagissent** avec la phase solide du sol (c'est l'**adsorption**) et sont **dégradées** directement ou indirectement par la microflore du sol, ou par des réactions physiques ou chimiques. Ces deux phénomènes ont une **importance capitale pour le devenir des pesticides dans les sols** – ils rendent aussi leur comportement (et indirectement leur transfert) hautement non-linéaire.

L'adsorption de solutés organiques par la phase solide du sol

L'adsorption est un phénomène de rétention réversible d'une molécule sur la phase solide du sol, qui aboutit à un équilibre entre les molécules adsorbées et les molécules restées libres dans la solution. La désorption est la libération de molécules adsorbées, suite à un changement dans la solution du sol. Un apport d'eau, ou un départ de molécule avec le flux d'eau cause une désorption partielle jusqu'à un nouvel équilibre. Une baisse de la teneur en eau, ou un nouvel apport de molécules, causent une adsorption supplémentaire de molécules. Quand la rétention n'est pas réversible, ou que les phénomènes d'adsorption–désorption jouent sur des intervalles de temps longs, on parle plutôt d'immobilisation. Les phénomènes d'adsorption–désorption ne sont pas instantanés : l'adsorption et la désorption agissent en suivant une cinétique plus ou moins rapide. Les aspects cinétiques de l'adsorption ne sont pas non plus présentés ici. Les effets du pH peuvent être importants pour l'adsorption des molécules ionisables, mais ils ne sont pas présentés ici.

La matière organique et les particules fines du sol ont un rôle essentiel dans les

phénomènes d'adsorption (Wauchope et al., 2002).

Les phénomènes d'adsorption ont des origines physiques ou chimiques diverses. L'adsorption *stricto sensu*, dans le sens de la formation de liaisons chimiques faibles entre les molécules et la phase solide du sol, est bien entendu un des principaux phénomènes. L'adsorption apparente pourrait être due à la diffusion des molécules dans la porosité la plus fine du sol, dans les agrégats de particules fines et les matières organiques (Calvet *et al.*, 2005). L'adsorption pourrait aussi avoir une origine biologique, par absorption dans des organismes (plante, micro-organismes ; Calvet *et al.*, 2005).

L'adsorption étant un phénomène complexe, dépendant des propriétés des molécules pesticides – très variées – et des propriétés des fractions organiques et minérales fines du sol – très variées et mal connues pour les premières – elle est difficile à modéliser au sens physico-chimique du terme (e.g. Wauchope *et al.*, 2002; Calvet *et al.*, 2007). La représentation des phénomènes d'adsorption passe généralement par des fonctions mathématiques qui en reproduisent le comportement global, sans réellement expliquer le phénomène. Ces modèles mathématiques doivent être calibrés expérimentalement via un ou plusieurs paramètres qui dépendent à la fois de la molécule et du sol.

L'ordre de grandeur, la variabilité spatiale et les déterminismes des propriétés d'adsorption de l'isoproturon dans les sols sont présentés dans le chapitre « L'isoproturon », p. 62.

□ *Représentation par le modèle linéaire*

$$\begin{array}{lll} Q_{eq.} = K_D. \ C_{eq.} & \text{avec :} \\ Q_{eq.} = \frac{M_{pest.,S}}{M_S} & C_{eq.} = \frac{M_{pest.,E}}{V_E} & M_{pest.,tot} = M_{pest.,E} + M_{pest.,S} \end{array}$$

équation 24 – Relation linéaire pour l'adsorption à l'équilibre, entre Q (phase solide) et C (phase liquide).

 $\bar{Avec} \ Q_{eq.} [M \ de \ molécules \ . M \ de \ sol \ sec^{-1}] \ ou \ (kg.kg^{-1}) \ la \ concentration \ de \ molécules \ sur \ la \ phase \ solide \ à \ l'équilibre \ ; \ K_D \ [V.M^{-1}], \ (m^3.kg^{-1}), \ le \ coefficient \ d'adsorption/de \ partage/de \ distribution \ ; \ C_{eq.} \ [M \ de \ molécules \ . V \ de \ solution^{-1}] \ ou \ (kg.m^{-3}) \ la \ concentration \ de \ molécules \ dans \ la \ phase \ liquide \ ; \ M_{pest,S} \ [M] \ ou \ (kg) \ la \ masse \ de \ pesticide \ adsorbée \ sur \ la \ phase \ solide \ ; \ M_S \ la \ masse \ de \ pesticide \ adsorbée \ sur \ la \ phase \ solide \ ; \ M_S \ la \ masse \ de \ pesticide \ en \ solution \ dans \ la \ phase \ liquide \ ; \ V_E \ [V] \ ou \ (m^3) \ le \ volume \ de \ la \ phase \ liquide \ ; \ M_{pest,E} \ [M] \ la \ masse \ de \ pesticide \ en \ solution \ dans \ la \ phase \ liquide \ ; \ V_E \ [V] \ ou \ (m^3) \ le \ volume \ de \ la \ phase \ liquide \ ; \ M_{pest,Lot} \ [M] \ la \ masse \ de \ pesticide \ en \ solution \ dans \ la \ phase \ liquide \ ; \ M_E \ [V] \ ou \ (m^3) \ la \ masse \ de \ pesticide \ dans \ la \ solution \ dans \ solution \ dans \ la \ solution \ dans \ la \ solution \ dans \ la \ solution \$

La manière la plus simple de décrire l'adsorption d'une molécule sur la phase solide du sol consiste considérer le rapport entre la 'concentration de molécules sur la phase solide' et la 'concentration de molécules dans la phase liquide' comme constant. Ce rapport, le K_D , est appelé 'coefficient de <u>d</u>istribution', 'coefficient d'adsorption' ou 'coefficient de partage'. Le calcul du K_D est donné par l'équation ci-dessous :

Cette relation suppose que l'équilibre entre la phase liquide et la phase solide est soit instantané, soit considéré après un temps suffisant pour que l'équilibre soit établi. Elle n'est valable qu'à une température donnée, d'où son nom d'**isotherme**.

□ *Représentation par le modèle de Freundlich*

La relation de Freundlich décrit l'adsorption d'une molécule sur la phase solide du sol en fonction d'un coefficient (constant) entre la 'concentration en molécule sur la phase solide' et la 'concentration en molécule dans la phase liquide', mais avec un coefficient de puissance additionnel qui rend la **relation non linéaire** en fonction des

variations de la concentration de la molécule dans la phase liquide.

$$Q_{eq} = K_F \cdot C_{eq}$$

équation 25 – Relation de Freundlich pour l'adsorption à l'équilibre, entre Q (phase solide) et C (phase liquide).

Avec $Q_{eq.}$ [M.M⁻¹] ou (kg.kg⁻¹) la concentration de molécules sur la phase solide à l'équilibre ; K_F [V.M⁻¹] ou (m³.kg⁻¹) le coefficient d'adsorption/de partage de Freundlich ; C_{eq.} [M.V⁻¹] ou (kg.m⁻³) la concentration de molécules dans la phase liquide ; N_F [-] le coefficient/exposant de Freundlich qui décrit le degré de courbature de la fonction.

Quand le coefficient N_F est égal à 1, la relation entre $Q_{eq.}$ et $C_{eq.}$ devient linéaire (équation 24).





On voit que quand on a $N_F > 1$, le rapport entre la concentration sur la phase solide et la concentration en solution augmente progressivement quand la concentration en solution (et donc quand la concentration globale) augmente. La situation s'inverse quand $N_F < 1$, tandis que le rapport reste constant (égal à K_F) quand $N_F = 1$.

A quantité de molécule égale, on constate aussi qu'une diminution de la teneur en eau du sol aura pour effet une augmentation de la quantité de molécules adsorbées. En effet, cela revient à augmenter la concentration de la solution, qui provoque une augmentation de la concentration sur la phase solide. Comme la masse de solide reste constante, cela implique une augmentation de la quantité de molécule sur la phase solide.

□ Normalisation de l'adsorption par le carbone organique

Dans les horizons de surface, les matières organiques du sol sont l'adsorbant le plus important (avant la fraction argileuse). On constate expérimentalement que l'adsorption est proportionnelle à la quantité de matières organiques, et que la relation entre les deux est assez linéaire (Wauchope, 2002). Pour cette raison, on normalise souvent le K_D par la quantité de carbone organique, ou la quantité de matière organique du sol :

équation 26 – Relation entre le K_D et la fraction de carbone (ou de matière) organique. f_{OC} [-] la fraction massique de carbone organique (<u>organic carbon</u>) du sol (M de carbone . M de sol sec⁻¹); K_{OC} [V.M⁻¹] ou (m³.kg⁻¹) le coefficient d'adsorption linéaire normalisé par la f_{OC} ; f_{OM} [-] la proportion de matière organique (*en anglais* : <u>organic matter</u>) du sol [M de matière organique . M de sol sec⁻¹]; K_{OM} [V.M⁻¹] le coefficient d'adsorption linéaire normalisé par la f_{OM} .

Une grande partie de la variabilité spatiale du K_D s'explique par les variations de la teneur en matières organiques du sol. Cependant d'autres facteurs contribuent à l'adsorption, si bien que le K_{OC} lui-même est variable dans l'espace (en fonction de la teneur en argile ou de variations locales des propriétés des matières organiques), mais dans des proportions moindres que le K_D .

En faisant l'hypothèse simplificatrice que le K_D ne dépend que de la quantité de matières organiques, le K_{OC} peut être vu comme une fonction de pédotransfert permettant d'estimer le K_D à partir de mesures de teneur en matières organique et d'une estimation de K_{OC} mesurée par ailleurs ou issue de la littérature (voir par exemple Coquet *et al.*, 2005*a*).

□ Aperçu des méthodes de mesure

L'adsorption d'un pesticide sur le sol est généralement mesurée en conditions contrôlées de laboratoire. La méthode générale consiste à mettre en contact du sol à une certaine teneur en eau avec une quantité connue de molécule pesticide, de laisser le système s'équilibrer, puis de mesurer la concentration en pesticide dans la phase liquide. La quantité de molécule adsorbée est connue par différence entre la quantité apportée et la quantité en solution, ce qui permet de calculer le coefficient d'adsorption. Le cas échéant, ces méthodes présupposent que **la molécule n'est pas dégradée** sur l'intervalle de temps de l'expérience.

Les méthodes diffèrent par le rapport sol/eau (Masse de sol / Masse d'eau) du système, et par l'utilisation d'une ou de plusieurs concentrations en pesticide au moment de l'apport (pour déduire le coefficient Kf). La méthode la plus fréquente est la méthode dite 'en batch', où l'adsorption est mesurée dans une boue liquide (excès d'eau par rapport au sol) qui est agitée. Elle a l'avantage d'être relativement facile à mettre en œuvre, mais l'inconvénient de se baser sur un rapport sol/eau et une déstructuration des agrégats absolument irréaliste par rapport à un sol réel. L'adsorption peut être mesurée sur de petites colonnes de sol, non perturbées ou reconstituées, dans lesquelles a été éluée une solution contenant le pesticide. Elles ont l'avantage d'être moins simplistes que la méthode en batch (rapport sol/eau réaliste, prise en compte de la structure du sol, prise en compte des effets des flux d'eau sur l'adsorption), mais elles sont plus complexes à interpréter (e.g. Guimont et al., 2005). Des méthodes intermédiaires ont été développées, qui consistent à mettre une solution de pesticide en contact avec un échantillon de sol, avec un rapport sol / eau élevé, avec de la solution contenant du pesticide, puis à extraire une partie de la solution du sol par **centrifugation** (e.g. Guimont *et al.*, 2005 ; Kah et Brown, 2007).

Dégradation des pesticides dans le sol

La dégradation des pesticides dans les sols peut résulter de processus physicochimiques (photolyse), chimiques (hydrolyses, oxydations...) ou biologiques. La dégradation de l'isoproturon étant essentiellement d'origine biologique, les phénomènes physico-chimiques et chimiques ne sont pas exposés ici.

La dégradation biologique des molécules pesticides dans les sols est le résultat de l'action de bactéries, champignons, d'algues ou de protozoaires du sol. Ces microorganismes peuvent agir seuls, en parallèle, ou en 'consortium' sur les différentes étapes de la dégradation, depuis la molécule pesticide jusqu'à sa minéralisation, en passant par ses métabolites. La dégradation biologique est essentiellement causée par certaines enzymes produites par les microorganismes. Elle peut être interne aux microorganismes, auquel cas les molécules doivent d'abord être absorbées, ou externes, avec les enzymes sécrétées dans le milieu extérieur. La dégradation peut être une source d'énergie ou de nutriments pour la bactérie, on parle alors de métabolisme. Elle peut aussi être 'accidentelle', quand elle est causée par une enzyme mais n'apporte pas d'énergie ou de nutriment au microorganisme qui l'a émise (Calvet *et al.*, 2005).

Les origines microbiologiques de la dégradation la rendent potentiellement dépendante des facteurs qui influencent l'action des microorganismes (et leur croissance) ou des enzymes : teneur en eau du sol, température, abondance globale ou spécifique des microorganismes, effet/abondance d'un substrat nutritif, vitesse de croissance des populations microbiennes, phénomènes d'adaptation au substrat 'pesticide', effet de la concentration en molécule pesticide dans la phase liquide, vitesse de dégradation limitée par l'abondance des enzymes, *etc.*

De la même manière que l'adsorption est le résultat d'une interaction entre les propriétés particulières d'une molécule et les propriétés particulières d'un sol, la dégradation du pesticide et sa cinétique sont propres à la molécule, au sol et aux populations microbiennes qu'il accueille (ces dernières étant en fait partie intégrante du sol). Comme pour l'adsorption, la cinétique de dégradation du pesticide n'est généralement pas décrite par un modèle de processus biologiques et chimiques, mais plutôt par des fonctions mathématiques qui en miment résultat global.

L'ordre de grandeur, la variabilité spatiale et les déterminismes des propriétés de dégradation de l'isoproturon dans les sols sont présentés dans le chapitre « L'isoproturon », p. 62.

□ *Représentation par une cinétique exponentielle d'ordre 1*

La dégradation d'une molécule dans le sol est souvent décrite par un modèle à exponentielle simple :

$$C_{(t)} = C_{(t=0)} \cdot e^{-k \cdot t}$$

équation 27 – Modèle de diminution de la concentration d'une molécule en fonction du temps suivant une cinétique de 1^{er} ordre.

Avec $C_{(t)}$ [M de molécule . M de sol sec⁻¹] ou (kg.kg⁻¹) la concentration massique de la molécule dans le sol au temps t ; $C_{(t=0)}$ la concentration de la molécule dans le sol au temps initial (apport de la molécule au sol), qui sera notée par la suite C_0 ; k [T⁻¹] ou (s) la constante de dégradation de la molécule. La concentration est souvent exprimée en concentration relative, adimensionnelle, $C_{R(t)} = C_{(t)} / C_0$, [-]. C'est cette unité qui sera utilisée dans la partie résultats. La constante de dégradation k permet de calculer le temps au bout duquel 50 % de l'apport initial de molécule a été dégradé :

$$DT_{50} = t_{(C=C_0/2)} = \frac{\ln(2)}{k}$$

équation 28 – Relation entre la constante de dégradation k et la demi-vie DT₅₀.

La DT_{50} [T] ou (s) est parfois notée DT50 ou $t_{1/2}$.

La figure 10 (p. 61) présente l'allure d'une cinétique de dégradation de 1^{er} ordre et d'une cinétique bi-exponentielle (exposée *ci-dessous*).

□ *Représentation par une cinétique bi-exponentielle*



figure 10 – Exemple d'allure de cinétiques de dégradation exponentielle et bi-exponentielle. Sur ces exemples : $\ln(2)/k1 = 5$ jours ; $\ln(2)/k2 = 50$ jours ; A = B = 50% de C_0 ; $\ln(2)/k = 21$ jours.

Il arrive qu'une cinétique de 1^{er} ordre ne décrive par correctement la dégradation observée de la molécule : celle-ci peut par exemple montrer une décroissance forte dans un premier temps, puis très ralentie dans un second temps. Une cinétique biexponentielle permet alors de décrire la dégradation de manière plus satisfaisante :

$$C_{(t)} = A \cdot e^{-k_1 \cdot t} + B \cdot e^{-k_2 \cdot t}$$

équation 29 – Modèle de diminution de la concentration d'une molécule en fonction du temps suivant une cinétique bi-exponentielle.

Avec A et B [M de molécule . M de sol sec⁻¹] deux constantes de concentration massique, A+B étant équivalent à $C_{(t=0)}$; k_1 et k_2 [T⁻¹] deux constantes de dégradation.

Le modèle a été proposé par Gustafson et Holden (1990) (cité par Beulke et Brown, 2001). Le modèle décrit la dégradation d'une même molécule ventilée en 2 pools dont l'importance à t = 0 et la vitesse de dégradation diffèrent. Ces deux pools, qui peuvent

J. Moeys | Partie I

par exemple représenter deux localisations différentes dans la porosité du sol, évoluent indépendamment l'un de l'autre (pas de terme d'échange). Quand B = 0, la cinétique globale devient une cinétique de premier ordre comme l'équation 28. Pour que l'allure d'une cinétique de 2nd ordre diffère sensiblement de l'allure d'une cinétique de 1^{er} ordre, il faut : (i) que les constantes de dégradation k1 et k2 soient suffisamment différentes (e.g. différant d'un facteur 5 à 10) (ii) que la différence entre A et B ne soient pas trop importante (e.g. A ou B > 15% de C₀).

Si ce modèle ajuste mieux des dégradations très biphasiques, il présente néanmoins quelques désavantages par rapport à l'exponentielle simple : il comporte deux constantes de dégradation, difficiles à comparer avec une valeur de demi-vie unique (Beulke et Brown, 2001) ; il comprend 4 paramètres, ce qui peut nuire à la robustesse des ajustements quand peu de données mesurées sont disponibles.

La fonction de 1^{er} ordre de cet exemple a en fait été 'ajustée' sur la cinétique de 2nd ordre (avec $C_0 = 100\%$), de manière à estimer la DT_{50} équivalente. On constate que dans ce cas, la cinétique de 1^{er} ordre sous-estime la dégradation dans un premier temps, puis la surestime par la suite.

Aperçu des méthodes de mesure des cinétiques de dégradation§

Il existe 3 principaux types de méthodes d'étude de la dégradation d'un pesticide. La première, et la plus courante, est l'étude de la dégradation en laboratoire, dans des microcosmes en conditions contrôlées de température et de teneur en eau. Cette méthode a été utilisée ici et elle est détaillée dans la partie « **matériels et méthodes** », p. 86. La seconde méthode est l'utilisation de colonnes de sol, remaniées ou non, dans lesquelles on fait éluer une solution contenant le pesticide (comme dans le cas de l'étude des flux d'eau ou de l'adsorption). La dégradation peut être déduite par inversion des données mesurées. Enfin, la troisième méthode est l'étude de la dissipation *in situ* du pesticide. Cette méthode a l'avantage de bien représenter les conditions réelles, mais l'inconvénient qu'aucune de ces conditions n'est contrôlée (d'où des difficultés possibles pour distinguer les effets des flux d'eau, de l'adsorption et de la dégradation).

3 L'isoproturon

L'isoproturon est une molécule utilisée pour le désherbage sélectif des céréales d'hiver ou de printemps (blé tendre d'hiver, blé de printemps, orge d'hiver, escourgeon, seigle d'hiver ou triticale¹⁷, mais pas le blé dur).

Elle cible principalement les **graminées annuelles** comme le vulpin des champs, l'agrostide ou jouet du vent, le pâturin annuel, le ray-grass et, dans une moindre mesure, la folle avoine ¹⁸ et de plusieurs **dicotylédones annuelles** (Roberts, 1998 ou Tomlin, 1994), dont la matricaire, le mouron blanc et l'alchémille (Rigaud et Lebreton, 2004). La molécule est **absorbée par les feuilles et les racines**, et a une action systémique, aboutissant à l'**inhibition de la photosynthèse** des adventices (Tomlin 1994).

L'isoproturon est rattaché à la famille des urées substituées, comme le chlortoluron.

¹⁷ Triticum aestivum L. subsp. aestivum ; Hordeum vulgare ; Secale cereale L. ; Triticosecale.

¹⁸ Alopecurus myosuroides ; Agrostis spica-venti ; Poa annua ; Lilium sp. ; Avena fatua.

La molécule est **appliquée en pré- ou post-levée**. Dans le secteur étudié, elle est surtout utilisée sur les céréales d'hiver et appliquée peu après le semis. Elle est aussi utilisée en 'rattrapage' de printemps, sur les mêmes céréales, si le désherbage hivernal n'a pas été satisfaisant.

La dose d'application maximale légale de l'isoproturon utilisé seul est de 1200 g.ha⁻¹. Une note d'information¹⁹ éditée à l'occasion du réajustement à la baisse de cette dose maximale rappelle que la dose doit être modulée en fonction des conditions pédologiques et du stade de croissance des adventices (entre 800 et 1200 g.ha⁻¹), avec des doses plus faibles pour (i) les sols avec un drainage interne important, dits « vulnérables » (sableux, 'crayeux', 'filtrants') (ii) les sols avec un faible teneur en argile (< 20 %) (iii) les adventices a un stade peu avancé (1 à 3 feuilles). Des doses intermédiaires sont préconisées sur les situations intermédiaires (teneur en argile entre 20 et 30 %, adventices en cours de tallage).

Une liste des produits commerciaux (formulations) comportant de l'isoproturon peut être retrouvée sur le site e-phy du Ministère de l'Agriculture et de la pêche, et de la SRPV (http://e-phy.agriculture.gouv.fr/mata/4818.htm, *dernier accès : octobre 2007*).

3.1 Structure chimique de l'isoproturon et de ses métabolites





Didéméthyl isoproturon

figure 11 – Formule plane de l'isoproturon et de ses métabolites. Le tableau 1 ci-dessous donne les noms IUPAC de l'isoproturon et de ses métabolites (IUPAC : *International Union of Pure and Applied Chemistry*).

L'isoproturon est une molécule organique de la famille des phénylurées. Ces dernières sont constituées d'un cycle phényle (C_6H_4) avec une molécule de méthylurée ((NH_2)–CO–NH–CH₃) sur l'un des carbones (carbone 1). Les différentes molécules de la famille des phénylurées se distinguent par la nature des groupements qui sont greffés sur l'azote de la méthylurée (en remplacement du H) et/ou sur le carbone 3, et/ou sur le carbone 4 du cycle phényle (en remplacement d'un H) (d'après Sorensen *et al.* 2003).

L'isoproturon est le 3-(-4-isopropylphényl)-N',N'-dimethylurée (figure 11, tableau 1), l'hydrogène carbone 4 étant remplacé par un groupement diméthyle.

L'une des principales voies de dégradation de l'isoproturon dans les sols est la déméthylation au niveau de l'atome d'azote, sous l'effet d'enzymes ou de microorganismes (Tomlin, 1994), aboutissant au mono-déméthyle isoproturon (MD-IPU) et au di-déméthyle isoproturon (DM-IPU). La phénylurée est ensuite hydrolysée (Tomlin,

¹⁹ « Note d'information commune : ARVALIS, APCA, FFCAT, FNA, FNSEA, IN VIVO, Jeunes Agriculteurs, Ministère de l'Agriculture, de l'Alimentation, de la Pêche et des Affaires Rurales, UIPP, COLUMA–AFPP. », 2003.

Nom courant	Nom IUPAC	Abrév.
Isoproturon	3-(-4-isopropylphényl)-N',N'-dimethylurée	IPU
Monodéméthyl isoproturon	3-(-4-isopropylphényl)-N'-methylurée	MD-IPU
Didéméthyl isoproturon	3-(-4-isopropylphényl)-urée	DD-IPU
Isopropyl anyline	4-isopropyl-aniline	4IA ; IPA

1994) pour aboutir à l'isopropylaniline ($(CH_3)_2CH - C_6H_4 - NH_2$, IPA).

tableau 1 – Nomenclature de l'isoproturon et de ses métabolites.

Abrev. : Abréviations possibles du nom de la molécule (d'après Sorensen et al., 2003).

■ 3.2 Propriétés physico-chimiques

L'isoproturon est une molécule peu volatile (pression de vapeur et constante de Henry faibles) et assez soluble dans l'eau. L'indicateur de liposolubilité Log(coefficient de partage octanol-eau), K_{ow} a une valeur intermédiaire.

Propriété	Conditions	Valeur	[Unité]	Source
Masse molaire	-	206,29	[g.mol ⁻¹]	1
Pression de vapeur	20°C	3,3	[µPa]	1,3,4
	22°C	2,8 à 8,1		2
	25°C	5,5		5
Constante de Henry		9,7e ⁻⁶ ; 14,6e ⁻⁶	$[Pa.m^3.mol^{-1}]$	1
	22 ou 25°C	14,6 ^{e-6}		2,5
Solubilité dans l'eau	20°C	70 ; 70,2	$[mg.L^{-1}]$	1,2,5
	22°C	65		3,4
K _{OW}	22°C (pH 7)	2,5	[-]	1,2,3,5
		2,48		4

tableau 2 – Principales propriétés physico-chimiques de l'isoproturon.

Références : (1) AgriTox, AFSSA–DIVE (2007), 25/06/2007 ; (2) SANCO (2002), Appendix 1 ; (3) Tomlin éd. (1994) ; (4) Roberts éd. (1998) ; (5) FOOTPRINT PPDB (2007).

NB : La base de données des propriétés des pesticides de l'USDA-ARS (PPDB) ne comporte pas d'informations sur l'isoproturon, ce dernier n'ayant pas été enregistré aux États-Unis.

NB : Différentes références peuvent en réalité s'appuyer sur les même sources, comme par exemple les dossiers d'homologation de l'union européenne, qui incluent des études non publiées.

L'isoproturon est peu dégradé dans l'eau, et ce quel que soit le pH (temps de demivie de dégradation > 200 jours (et jusque 5400 jours) sur une gamme de pH de 5 à 13 (AgriTox, AFSSA–DIVE, 2007; SANCO, 2002, Appendix 1). Les études de photodégradation dans l'eau ont des résultats plus variables : un temps de demi-vie de dégradation s'étalant entre 4,5 et 88 jours (source : AgriTox, 2005). La photodégradation en surface du sol est faible : 90 % restant après 30 jours (SANCO, 2002, Appendix 1).

L'isoproturon n'est <u>pas</u> une molécule ionique, elle ne se dissocie pas dans l'eau (pas de constante de dissociation).

■ 3.3 Homologations des usages

En France, l'« avis aux distributeurs et utilisateurs de produits anti-parasitaires visés par l'article L 253-1 du code rural » (Journal officiel de la République française du 18 février 2004) fixe la dose maximale d'application de l'isoproturon utilisé seul à **1200** grammes par hectares.

L'isoproturon a été homologué pour l'Europe, par son inscription par amendement de l'annexe 1 de la directive 91/414/EEC (Off. J. Eur. Cum., 1991) d'autorisation de

mise sur le marché de produits de protection des plantes (Annexe 1 : « Substances actives autorisées pour les produits de protection des plantes ») et par la directive 2002/18/EC (Off. J. Eur. Cum., 2002). Les molécules inclues dans l'annexe 1 doivent ensuite être réexaminées par chaque état membre pour s'assurer que les 'usages représentatifs' examinés au niveau européen sont bien valables dans le contexte national (Pesticides Safety Directorate (PSD), 2007). La directive 2002/18/EC sur l'isoproturon se base sur le rapport du 7 décembre 2001 de la direction générale « santé et protection des consommateurs » (SANCO ; SANCO/3045/99-final 12 March 2002). Elle souligne notamment que les états :

- Doivent le cas échéant porter une attention particulière à la protection des eaux souterraines, quand la molécule est appliquée dans des régions dont les sols, les conditions climatiques, ou une utilisation à des doses supérieures à celle préconisée par le rapport d'évaluation [1,5 kg.ha⁻¹ utilisé seul] et doivent appliquer des mesures d'atténuation [des risques de transferts] (*Traduit de l'anglais*);
- Doivent porter une attention particulière à la protection des organismes aquatiques et s'assurer que l'autorisation s'accompagne de mesures d'atténuation (*Traduit de l'anglais*);

Cette directive a été transposée en France dans le Journal officiel du 13 avril 2002, valable pour 4 ans et fixant le délai de réexamen de l'isoproturon au 1^{er} janvier 2007 (réexamen en cours ?).

La molécule n'est <u>pas</u> enregistrée / homologuée aux États-Unis, au Canada et en Australie (entre autres), mais elle est enregistrée en Inde et en Nouvelle-Zélande (PAN Pesticide Database, 2007 ; *pour les pays les plus importants*)

La molécule n'est plus autorisée depuis 1999 au Danemark (Danish Environmental Protection Agency, Ministry of the Environment 2001, cité par PAN Pesticide Database, 2007).

Au Royaume-Uni, le Pesticide Safety Directorate (PSD, 2007) a récemment (15/03/2007) décidé de ne pas renouveler l'autorisation de mise sur le marché de l'isoproturon, notamment du fait des « risques inacceptables pour la vie aquatique [...] qui découlent des transferts d'isoproturon vers les cours d'eau de surface via le réseau de drainage dans les aires traitées » dans le contexte hydro-pédologique qui prévaut outre manche.

3.4 Évaluation de son comportement dans les sols

Informations fournies par les bases de données et les ouvrages de référence

$\Box \qquad Adsorption (K_{OC})$

Le coefficient d'adsorption K_{OC} de l'isoproturon – qui reflète son degré de mobilité (ou plutôt son degré d'immobilisation par la phase solide du sol) – est en moyenne entre 120 et 140 L.kg⁻¹, ce qui en fait une **molécule de mobilité intermédiaire** (par rapport à d'autres molécules, si l'on se réfère par exemple à la figure 1 dans Wauchope, 2002). La du K_{OC} est néanmoins importante, ce qui suggère que la réactivité de cette dernière n'est pas uniquement contrôlée par la <u>quantité</u> de matières organiques, mais aussi par d'autres paramètres comme les propriétés physicochimiques de la matière organique ou la réactivité vis à vis des argiles (explications

. ,			
	K _{OC} [L.kg ⁻¹]	$K_{\rm F} \left[{\rm L.kg}^{-1} \right]$	n _F [-]
AgriTox	36 à 241, m = 122	0,26 à 27,1	0,84
SANCO 2001	36 à 241, m = 122	0,26 à 27,1	
Tomlin éd. 1994		0,8 à 4,2	
Roberts éd. 1998	125		
FOOTPRINT PPDB 2007.	139		

tableau 3 – Valeurs d'adsorption (K_F ou K_{OC}) de l'isoproturon fournies par les bases de données internationales et certains ouvrages de référence.

Les remarques du tableau 2 ci-dessus s'appliquent aussi aux données d'adsorption.

□ *Dégradation : DT*₅₀ *au laboratoire*

possibles).

	DT ₅₀ [j]	T. [°C]	Туре
AgriTox	13; 16,6; 13,2; 12,9; 15,2; 9,7; 11,1	20°C	lab, ae
	24°C	lab, ae	
	16,5 ; 8,7 ; 9,2	21°C	lab, ae
SANCO 2001	7,2 à 18,2, m = 12.6	20°C	lab, ae
	27 à 53	10°C	lab, ae
Tomlin éd. 1994	6 à 28	?	lab, ae
FOOTPRINT PPDB	7,2 à 18,2, typique = 12	20°C	lab, ae?

tableau 4 – Valeurs de dégradation (DT_{50}) aérobie en laboratoire de l'isoproturon fournies par les bases de données internationales et certains ouvrages de référence.

Les remarques du tableau 2 ci-dessus s'appliquent aussi aux données de dégradation.

Comme pour l'adsorption, la vitesse de dégradation de l'isoproturon s'avère intermédiaire (par rapport à d'autres molécules, si l'on se réfère par exemple à la figure 1 dans Wauchope, 2002) mais relativement variable.

La demi-vie de l'isoproturon mesurée au champ est généralement plus élevée que celle mesurée en conditions contrôlées de laboratoire. La base de données pesticides Footprint indique par exemple une DT_{50} au champ, en conditions aérobies, entre 12 et 33 jours, contre 7,2 à 18,2 jours en laboratoire.

L'isoproturon est très peu dégradé en conditions anaérobies (1 donnée, AgriTox 2007).

Adsorption et vitesse de dégradation : variabilité et déterminismes rapportés par la littérature scientifique

$\Box \qquad Adsorption (K_{OC})$

On constate (tableau 5 ci-dessous) que les valeurs mesurées du coefficient d'adsorption de l'isoproturon sont variables, s'étalant de 0.85 à 4.4 L.kg^{-1} . Il est en fait assez difficile de comparer des valeurs de K_F avec des valeurs de K_D , notamment quand le paramètre de forme N_F s'écarte significativement de 1. Les coefficients de variation du K_D ou du K_F vont de 11 % à 41 %. Cette variabilité, qu'elle soit spatiale ou non (mesure sur différents types de sol sans 'unité de lieu'), ne semble pas clairement liée à la surface échantillonnée (dans l'idée qu'une grande surface augmente le CV),

ce qui indiquerait différents niveaux de variabilité spatiale. Les valeurs de K_{OC} sont elles aussi variables, dans des proportions similaires (valeurs de 43 à 342 L.kg⁻¹, CV de 11 à 46 %). Les références citées ci-dessus n'utilisent pas forcément les mêmes méthodes, ce qui peut induire un biais méthodologique. Les valeurs moyennes de K_D ne semblent pas liées au ratio sol-eau utilisé pour les mesures (données non présentées ici).

Référence	K _D	K _F	$N_{\rm F}$	K _{OC}	CV	n	surf.
unités	[L.kg ⁻¹]	$[L.kg^{-1}]$	[-]	$[L.kg^{-1}]$	% [-]	[-]	[ha]
Beck, 1996 <i>a</i>	3,70	-	-	(74)	28% ; ?	25	?
Walker, 1998	-	1,12	0,83	70	-	2	n.c.
Lennatrz, 1999	0.92	-	-	(77)	43% ; ?	99	1,8
Coquet, 2002	0,85	1,01	0,88	66	30% ; 12%	51;14	187
Walker, 2001	1,19	-	-	47	11% ; 11%	30	5
Konda, 2002	-	1,19	0,53	174	-	1	n.c.
Spark, 2002	2,16	-	-	43	41% ; 28%	5	n.c.
Alletto, 2004	4,4	-	-	342	12% ; 13%	3	22
Cooke, 2004	4,23	-	-	231	40% ; 32%	5	n.c.
Elkhattabi, 2004	-	1,43	0,87	98	-	2	n.c.
Boivin, 2006	-	3,35	0,92	195	25% ; 46%	13	n.c.
Bending, 2007	0,91	-	-	61	-	2	n.c.
Vincent, 2007	2.8	-	-	143	-	4	n.c.

tableau 5 – Comparaison des valeurs de K_D, K_F, N_F ou K_{OC} de l'isoproturon trouvées dans la littérature scientifiques (*liste non-exhaustive*).

Les K_{OC} entre parenthèses ont été estimés à partir du K_D ou K_F moyen, et normalisés par la valeur moyenne de la fraction de carbone organique. Les références citées sont Beck et Jones (1996), Walker et Jurado-Exposito (1998), Lennartz (1999), Coquet et Barriuso (2002), Walker *et al.* (2001), Nemeth-Konda *et al.* (2002), Spark et Swift (2002), Alletto (2004), Cooke *et al.* (2004), Elkhattabi *et al.*, (2004), Boivin *et al.* (2006), Bending et Rodriguez-Cruz (2007), Vincent *et al.* (2007), citant Madrigal *et al.* (2002) et Madrigal (2004).

Les différences de valeurs de K_{OC} mesurés montrent que l'adsorption de l'isoproturon n'est pas uniquement contrôlée par la quantité de matière organique. Ainsi, Bending et Rodriguez-Cruz (2007) ne notent pas une variation forte de l'adsorption de l'isoproturon avec la profondeur du sol sur un profil, malgré une teneur en matière organique décroissante. Lennartz (1999) conclut que l'influence du carbone organique sur le K_D est modérée à l'échelle d'une parcelle dont les teneurs en carbone sont plutôt faibles. Vincent *et al.* (2007) constatent au contraire que l'adsorption de l'isoproturon est expliquée par la teneur en matière organique, de même que Boivin *et al.* (2006), Cooke *et al.* (2004) et Coquet et Barriuso (2002, r = 0.93).

Le pH est aussi un facteur explicatif de l'adsorption. Ertli *et al.* (2004) reportent que l'isoproturon est plus adsorbé dans une solution à pH 5 que dans une solution à un pH 8. Coquet et Barriuso (2002) établissent que l'influence du pH sur l'adsorption de l'isoproturon vient en 2^e position après celle de la matière organique (dans le cadre de leur étude).

Clausen *et al.* (2001), et Clausen et Fabricius (2001) montrent que l'isoproturon n'est pas adsorbé sur des minéraux comme le quartz, la calcite, l'alpha-alumine ou les oxydes de fer, mais que la molécule est adsorbée sur la kaolinite, avec un Kd de 1,15 L.kg⁻¹. Clausen *et al.* (2001) signalent que ce résultat est cohérent avec celui

trouvé par Worral *et al.* (1996), qui trouvent un K_d de 2,15 L.kg⁻¹ sur la kolinite. Coquet (2003) montre aussi que l'adsorption de l'isoproturon est bien corrélée à la teneur en argile (en tant que fraction grannulométrique $< 2 \,\mu m$) dans la zone non-saturée. Pantani *et al.* (1997) montrent que l'isoproturon est adsorbé sur la montmorillonnite et la kaolinite, notamment quand la surface de ces dernières est saturée par un cation hydrophobe.

Référence	m(DT ₅₀)	min–max	CV	Т	θ / h	n	surf.
unités	[j]	[j]	[-] %	[°C]			[ha]
Beck 1996b	89	31–483	89%	< 10°C	Δ	25	?
Perrin-Ganier 1996	19	?	?	20°C	80 % cc	1	n.c.
Jurado-Exposito 1998	15	?	?	20°C	20 % m.	2	n.c.
Berger 1999	8,67	?	?	20°C	40 % m.	3	n.c.
Walker 2001 / 2002	?	6,5–30	?	15°C	–33 kPa	30	5
Elkhattabi 2004	41	-	-	20°C	80 % cc	2	n.c.
Walker 2004		7–8 ou		15°C	40 % cc	5	
		15,8–24					
Beulke 2005	18,6	-	-	15°C	40 % m.	1	n.c.
Charnay 2005	13	6–32	46%	28°C	90 % cc	14	135
Issa 2005	16,6	-	-	25°C	27 % m.	1	n.c.
Rodriguez-Cruz 2006	3,27	1,4–12,9	42% [*]	15°C?	–33 kPa	20	1,44
Alletto 2006a	11	-	-	22°C	90 % cc	3	22
Bending 2007	15,60			15°C	40 % cc	2	n.c.
Vincent 2007	15,2	7,8–25	-	18°C	80 % cc	5	n.c.

$\Box \qquad Dégradation (DT_{50})$

tableau 6 – Comparaison des valeurs de temps de demi-vie (DT_{50}) de l'isoproturon trouvées dans la littérature scientifique (*liste non-exhaustive*).

m(DT₅₀) : DT50 moyenne ; min-max : valeurs minimales et maximales ; CV : coefficient de variation ; T : température ; θ / h : teneurs en eau ou potentiels exprimés selon différentes unités ; n : nombre d'échantillons mesurés ; surf. : surface étudiée ; n.c. : non-concerné (mesures non spatiales) ; Δ : variable ; cc : Teneur en eau à la capacité au champ (pF2 ou pF2,5 ou h=-33kPa) ; m. : Teneur en eau massique [g d'eau . g de sol sec⁻¹] ; Le potentiel de -33kPa correspond au pF2,5 approximativement ; n.c. : non-concerné. Les références citées sont Beck et Jones (1996b) ; Perrin-Ganier *et al.* (1996) ; Jurado-Exposito et Walker (1998) ; Berger (1999) ; Walker *et al.* (2001), Walker *et al.* (2002) ; Elkhattabi *et al.* (2004) ; Walker et Austin (2004) ; Beulke *et al.* (2005) ; Charnay *et al.* (2005) ; Issa et Wood (2005) ; Rodiguez-Cruz *et al.* (2006) ; Alletto *et al.* (2006a) ; Bending et Rodriguez-Cruz (2007) ; Vincent *et al.* (2007) citant Madrigal (2004).

Comme pour l'adsorption, les temps de demi-vie de dégradation de l'isoproturon mesurés sont variables d'une étude à l'autre, avec des valeurs moyennes par étude s'étalant entre 3,27 et 19 jours, pour les études réalisées avec une température d'incubation supérieure ou égale à 15°C. Les études portant sur un nombre d'échantillons plus conséquent montrent une variabilité intra-parcellaire supérieure à 40 %, ou un facteur 3 entre la valeur la plus faible et la valeur la plus forte. Charnay *et al.* (2005) montrent que la variabilité peut être du même ordre de grandeur à l'échelle de plusieurs parcelles / d'un secteur agricole de 135 ha, des résultats très similaires à ceux obtenus dans un autre contexte et à une échelle intra-parcellaire par Walker *et al.* (2001).

J. Moeys Partie I

Si la teneur en eau du sol et sa température influencent fortement la dégradation de l'isoproturon (études en laboratoire de Beulke *et al.* 2005 ; Issa et Wood, 2005 ; Alletto *et al.*, 2006*a*), elles n'expliquent pas ou peu la variabilité spatiale (à un temps donné) de cette propriété. Une dégradation chimique, et notamment photochimique de l'isoproturon est possible, mais l'activité de la microflore du sol semble être – de loin – la principale voie de dégradation de l'isoproturon dans les sols, comme pour les autres urées substituées (Sorensen *et al.*, 2003). La variabilité spatiale élevée de la dégradation de l'isoproturon, à l'échelle intra-parcellaire (Walker *et al.* 2001 ; Rodiguez-Cruz *et al.* 2006 ; El-Sebai

2007) comme inter-parcelle (Charnay *et al.*, 2005), et le faible nombre de facteurs agronomiques ou pédologiques actuellement identifiés (essentiellement le pH, dans certaines études, e.g. Bending *et al.*, 2006) suggèrent que la dégradation est le fait de quelques micro-organismes spécifiques (bactéries), seuls ou en association (Sorensen *et al.*, 2003), dont la répartition est elle-même hétérogène. Des indices convergents suggèrent que des processus d'adaptation d'une partie de la microflore du sol à la dégradation de l'isoproturon sont possibles et provoquent une dégradation accélérée de la molécule. Ces adaptations ont des effets variables dans le temps (e.g. Walker et Austin, 2004) et ne réduisent pas pour autant la variabilité de la dégradation de la molécule (Sorensen *et al.*, 2003).

La dégradation de l'isoproturon dans les horizons de sub-surface (entre la base de l'horizon labouré et la base du sol) ou dans la zone non-saturée décroît rapidement avec la profondeur. Bending et Rodriguez-Cruz (2007) montrent ainsi que la DT_{50} de dégradation double entre l'horizon de surface et l'horizon 70-80 cm. Des résultats similaires avaient été obtenus par Rodriguez-Cruz *et al.* (2006) sur la même parcelle. Dans le même secteur que l'étude présentée ici (Ouarville), Alletto *et al.* (2006*a*) montrent que la DT_{50} de l'isoproturon est presque multipliée par 5 au minimum entre l'horizon de surface et les horizons profonds, (à 10°C et 90 % de la capacité au champ), et presque par 40 dans un horizon argilo-calcaire. Issa et Wood (2005) observent aussi une décroissance de la dégradation de l'isoproturon avec la profondeur, mais uniquement en conditions aérobies (la dégradation étant très réduite en conditions anaérobies). Larsen et Aamand (2001) montrent que la décroissance de la vitesse de dégradation se réduit encore avec la profondeur dans la zone non-saturée (jusque 9,5 m), en conditions aérobies ou anaérobies.

3.5 Occurrences de l'isoproturon dans les eaux de surface et souterraines

Année(s)	Eaux de Surface	Eaux souterraines
2004	19,3%	1,2%
2003	18,5%	1,8%
2002	21,2%	1,9%
2001	22,9%	3,4%
1999-2000	18,7%	3,6%
1997-1998	≈ 22%	≈ 5%

tableau 7 – Proportion des analyses d'eau de surface et souterraine pour lesquelles l'isoproturon a pu être quantifié (présence), d'après les données IFEN.

Sources : IFEN 2006 (Dossier n°5, données 2003-2004) ; IFEN 2004 (Étude n°42, données 2002) ; IFEN 2003 (Étude n°37, données 2001) ; IFEN 2002 (Étude n°36, données 1999-2000) ; IFEN 2000 (Études et travaux, données 1997-1998).

Le tableau 7 ci-dessus montre que si la proportion d'analyse d'**eaux souterraines** pour lesquelles l'isoproturon a pu être quantifié est en **baisse significative depuis** **1997-1998 jusqu'en 2004** (en France métropolitaine ; 14^e molécule la plus retrouvée en 2003), la quantification de l'isoproturon dans les **eaux de surface reste importante**, autour de 20 % des analyses (6^e molécule la plus retrouvée en 2003 et 2004).

Sorensen *et al.* (2003), citant l'Environment Agency (2001) (Royaume-Uni) donne des chiffres similaires – voir plus graves – pour l'Angleterre et le Pays de Galles, avec 14% d'analyses dépassant les seuils des $0.1 \,\mu g.L^{-1}$ dans les eaux de surface en 2000. Au Danemark, des études comme celle de Spliid et Koppen (1998) ont conduit au retrait de la molécule du marché danois. Pour cette étude, qui porte sur 4 bassins versants contrastés, avec 300 analyses réparties entre 1,5 et 5 mètres, l'isoproturon était détectable dans 3,3% des analyses, parfois au-dessus de la norme de $0.1 \,\mu g.L^{-1}$.

Dans sa fiche isoproturon, l'INERIS (2007) estime que les ventes d'isoproturon actuelles (2007) en France à **1000 tonnes par an**, et suppose que les ventes de la molécule ont fortement baissé ces dernières années en France (**division par deux depuis le début des années 2000**). Cette estimation ne peut être étayée par des chiffres de ventes officiels au niveau français ou européen, qui sont inexistants (INERIS, 2007). En Grande-Bretagne, les statistiques d'usage des pesticides (*'Pesticides Usage Statistics'*) réalisées par le CSL (*'Central Science Laboratory'*) indique que l'usage de l'isoproturon est passé de presque 3182 tonnes.an⁻¹ en 1990-1991, à presque 3477 tonnes.an⁻¹ en 1998-1999, puis est redescendu à **2290 tonnes.an**⁻¹ **en 2005**. Dans le même temps, les surfaces traitées sont passées de 2,2 millions d'hectares à 3,5 millions d'hectares avant de redescendre à **2,1 millions d'hectares**.

J. Moeys | Partie II

Partie IILe secteuragricole deOuarville

Bibliographie locale & description du secteur géographique étudié
1 Localisation géographique

■ 1.1 Localisation

Le secteur agricole étudié est situé autour de la commune de Ouarville, à l'est du département de l'Eure-et-Loir, en France. Il est situé en Beauce chartraine, une des petites régions agricoles qui composent l'ensemble plus vaste de la Beauce (figure 12).

Les coordonnées géographiques de la commune de Ouarville sont : $1^{\circ}77'47,12713$ Est et $48^{\circ}35'43,87809$ Nord (World Geodesic System 1984), ou X:558000 m Est et Y:1073000 m Nord (NTF, Lambert 1).



figure 12 – Localisation du secteur étudié à l'échelle de la France.

Les variations de teintes orangées représentent le relief 'en ombres' (EEA, 2004) ; le tracé rouge au sein du territoire français est le département d'Eure-et-Loir ; la plage grise est la Beauce (région agricole) ; le carré noir au sein de cette région localise le secteur étudié ; Les deux fleuves représentés par un tracé bleu sont la Seine (au nord) et la Loire (au sud ; les autres fleuves français n'étant pas représentés).

■ 1.2 Extension

Le secteur s'étend sur 2600 ha (figure 13), dans un périmètre de 5,3 km par 5,3 km. La délimitation précise du périmètre d'étude correspond à la carte des sols du secteur (figure 18, p.80) utilisée pour notre étude (Cabinet Veillaux, 2000).

L'emprise de la carte des sols a été définie comme un **périmètre opérationnel pour le plan d'Action de Ouarville**, un programme visant à réduire les pollutions par les produits phytosanitaires du captage d'Alimentation en Eau potable (AEP) de Ouarville (Ailliot et Sallé, 2003). Ce programme a été initié par le GREPPPES (Groupe Régional pour l'Étude de la Pollution par les Produits Phytosanitaires des Eaux et des Sols).

Le périmètre opérationnel du plan d'action a été dérivé des **limites du bassin** versant de 128 km^2 qui alimente le captage d'Alimentation en Eau Potable de Ouarville, tel que délimité en 1999 (bureau d'étude ANTEA, 1999, cité par Panel, 2000).



■ 1.3 Géographie



Les courbes isovaleurs bleues représentent les courbes de niveau indiquées par la carte IGN au 1/25 000 du secteur ; les plages grises représentent les zones urbanisées ou anthropisées ; les places avec des hachures verticales vertes sont les zones boisées ; Le rectangle rouge représente l'emprise de la carte des sols (coordonnées nord, sud, est et ouest maximales). Digitalisation et infographie J. Moeys, sur base de la carte IGN et d'images satellites.

Le secteur est centré sur la **commune** de Ouarville, mais il empiète aussi sur le territoire des communes de Réclainville (au nord-ouest), Louville-la-Chenard (au nord-est), Santeuil (au sud-ouest) et Denonville (au sud-est). Deux villages sont présents sur le secteur (Ouarville et Santeuil), ainsi que 6 hameaux (Moinville-la-Bourreau, Ensonville, Ossonville, Edeville, Manchainville et Monvillier). Si l'on ajoute la surface occupée par l'incinérateur de la commune de Ouarville, ainsi que par divers éléments anthropiques, la surface urbanisée est de 140 ha (calcul n'intégrant pas les

	Surface	Pourcentage
zones anthropisées (villages)	140 ha	4,6%
routes et chemins	42 ha	1,4%
zones boisées	65 ha	2,2%
activité agricole	2 764 ha	91,8%
TOTAL	3 011 ha	-

aménagements récents autour de Ouarville).

tableau 8 – Occupation des sols dans le secteur étudié.

Les surfaces ont été estimées sur le polygone d'emprise de la carte des sols, à partir des données digitalisées, et non sur la surface exacte de la carte des sols (2675 ha). La surface occupée par les voiries est une estimation à partir d'une largeur arbitraire (10 ou 5 m). La catégorie 'activités agricoles' peut intégrer accidentellement des secteurs non définis comme tels par le cadastre.

Le secteur est coupé par deux **routes principales** qui se croient au niveau de Ouarville, et par plusieurs routes secondaires. Une ligne TGV passe au nord-ouest du secteur (repère important sur les images satellitales). Les parcelles, de grandes tailles, sont desservies par un réseau de chemins agricoles.

Le secteur a connu plusieurs **remembrements** agricoles depuis la fin de la 2^e guerre mondiale, en 1958 puis en 1992. Il en résulte un agrandissement important de la taille moyenne des parcelles, ainsi que la disparition ou le déplacement de nombreux chemins agricoles. La taille moyenne des parcelles cultivées est ainsi supérieure à 10 ha (estimation sur les surfaces repérées visuellement sur une image satellite spot de 2003, au nombre de 274, sans vérifications visuelles sur le terrain ; leur nombre réel est certainement inférieur, et leur taille moyenne supérieure à cette estimation). Les îlots (surfaces cultivées continues gérées par le même exploitant) ont une taille moyenne de 30 ha, et peuvent atteindre 200 ha.





De haut en bas, et de gauche à droite : Commune de Ouarville ; Pivot d'irrigation et chemin agricole au nord-est d'Ensonville, Moulin de Ouarville ; Petit bois ('Bois bouteiller') au sud de Monvillier ; Deux parcelles traversées par un talweg, entre le bois bouteiller et Manchainville (non loin de la parcelle d'étude). Notez la faiblesse du 'relief'.

La **topographie** locale est **quasiment plane**, avec un relief très peu marqué, s'étendant entre 145 mètres (au niveau de Santeuil) et 152,5 mètres (autour de Ouarville). La **partie la plus plane**, assimilable à un plateau, est **centrée autour de Ouarville**. Au nord, à l'ouest et au sud, de petits talwegs peuvent être distingués et s'agrandissent à mesure que l'on s'écarte de cette zone centrale. Les pentes inférieures à 0,5 occupent

65 % du secteur, celles comprises entre 0,5 et 1 % occupent 22 % du secteur, et celles comprises entre 1 et 1,5 % ne comprennent pas plus de 7 % de la surface. Les 6 % du territoire restant ont des pentes 'relativement' plus importantes, avec un **maximum de 6** %. Les pentes s'accentuent logiquement depuis le plateau, l'apparition des talwegs et les talwegs un peu plus prononcés, aux extrémités du secteur. Les calculs ont été réalisés sur un modèle numérique de terrain issu de la digitalisation des courbes de niveau IGN, suivie d'une interpolation pondérée par l'inverse du carré de la distance sur un raster de maille 10 m par 10 m).

2 Données météorologiques

De par son hétérogénéité spatiale et temporelle, le climat est un facteur important pour comprendre et expliquer l'hétérogénéité de la dissipation des produits phytosanitaires dans les sols (voir par exemple Giambelluca 1996 ; Koren *et al.*, 1999 ; Aylmore et Di, 2000, van Alphen et Stoorvogel 2002). Le travail présenté ici ne comprend pas de modélisation informatique du comportement des produits phytosanitaires dans les sols. Il n'utilise donc pas explicitement de données météorologiques. Il est néanmoins important de rappeler les caractéristiques climatiques de la Beauce chartraine, afin de mettre en perspective les enjeux de ce travail.

Type de climat

Le climat de la région est un climat tempéré, océanique altéré, se caractérisant par des précipitations un peu moins importantes que sur les façades océaniques, et des contrastes de température un peu plus accentués (Choisnel, 1992, cité par Rigaud 1998). La répartition des précipitations est aussi plus homogène sur l'année.

Températures moyennes

La **température moyenne annuelle**, relevée à la station Champhol près de Chartres est de **10**,8°C (moyenne entre l'année 1971 et l'année 2005 ; sa valeur *médiane* est quasiment identique). Les variations de températures saisonnières ont une amplitude modérée, avec à peine 14°C d'écart entre la température médiane des mois les plus froids (env. 4°C, en décembre et janvier) et celle des mois les plus chauds (env. 18°C, en juillet et août ; voir la figure 15–A). La transition entre les mois chauds et les mois froids est progressive. L'écart médian entre les températures journalières minimales et maximales est faible en hiver (5°C), et un peu plus important en été (11°C). Les variations interannuelles de température pour un mois donné sont plus importantes en hiver qu'en été, mais restent modérées (env. 5°C d'écart entre les valeurs non-extrêmes minimales et maximales) et homogènes d'un mois à l'autre.

Une dizaine de **jours de gel** sont observés en décembre, janvier et février (**valeur médiane**, voir la figure 15–B), et cinq jours environ pour novembre et mars. Les **variations interannuelles du nombre de jour de gel sont conséquentes** pour ces mois de l'année. Certaines années connaissent des gelées tardives en avril.





Les graphiques 'box & whisker' sont expliqués p. 135 ; données météorologiques journalières de la station de Champhol, près de Chartres, entre l'année 1971 et l'année 2005 ; les graphiques 'box & whisker' donnent les statistiques de la température moyenne ($(P_{MIN}+P_{MAX})/2$) pour chaque mois de l'année ; la courbe en trait plein reprend les valeurs médianes, et les deux courbes en tiret donnent la médiane mensuelle interannuelle des températures minimales P_{MIN} et maximales P_{MAX} . La droite horizontale en pointillés donne la température médiane interannuelle.

NB : Les légers décalages entre les valeurs médianes des graphiques 'box & whisker' et celles de la courbe sont dus à une différence de méthode de calcul des fonctions utilisées.

Précipitations moyennes, répartition mensuelle





Les statistiques sont tirées de données météorologiques journalières ; les graphiques 'box & whisker' donnent les statistiques (A) des précipitations et (B) de l'évapotranspiration <u>potentielle</u> (ETP) de Penman-Monteith pour chaque mois de l'année ; la courbe en trait plein reprend les valeurs médianes, et la droite horizontale en tirets donne la précipitation médiane interannuelle.

Le niveau de précipitation cumulée annuelle est de **605 mm de pluie**. La valeur médiane mensuelle est de **46 mm d'eau par mois**, avec des variations d'un mois à l'autre assez faible, au maximum de **11 mm** (en valeur médiane ; voir la figure 16–A). Les précipitations mensuelles les plus faibles sont en février et mars (39 à 40 mm), et les plus fortes en mai et juillet (57 et 55 mm).

On constate que **les variations interannuelles de précipitation cumulées mensuelles sont conséquentes** (relativement aux valeurs médianes), avec environ 100 mm d'écart entre les valeurs non-extrêmes minimales et maximales. Les mois de septembre, octobre, janvier et février, et dans une moindre mesure le mois d'avril, connaissent les variations interannuelles de pluviométrie cumulée mensuelle les plus fortes.

L'évolution saisonnière de l'évapotranspiration potentielle (ETP; calculées selon la méthode Penman-Monteith; voir la figure 16–B) suit logiquement les variations de température. Elle oscille entre 15 mm au cœur de l'hiver et 125 mm en été. Contrairement aux températures, les variations interannuelles de l'ETP cumulée mensuelle ne sont pas homogènes au cours de l'année, les mois de juin, juillet et août connaissant les variations les plus importantes.

Évènements exceptionnels : précipitations



figure 17 – Graphique 'box & whisker' des précipitations journalières maximales de chaque mois entre 1971 et 2005.

Les statistiques sont tirées de données météorologiques journalières ; les graphiques 'box & whisker' donnent les statistiques des précipitations journalières maximales pour chaque mois de l'année ; la courbe en trait plein reprend les valeurs médianes, et la droite horizontale en tirets donne la valeur médiane des précipitations journalières maximales interannuelles.

Sur la base des données journalières des précipitations entre 1971 et 2005, on constate que les précipitations journalières maximales du mois sont plus importantes en juillet que pendant le reste de l'année (en valeur médiane comme en valeurs extrêmes). Ces précipitations journalières maximales sont aussi un peu plus importantes que la valeur médiane en mai, juin, août, septembre et octobre.

Il serait nécessaire d'analyser des données météorologiques recueillies à une résolution temporelle inférieure à la journée pour se faire une idée plus précise des évènements pluvieux exceptionnels, mais ces chiffres reflètent – entre autres – des **pluies d'orages importantes en été**, et notamment en juillet.

3 Activités agricoles

La Beauce est souvent surnommée « le grenier à blé de la France ». Le tandem géologique dominant 'limon éolien sur calcaire', dans un relief généralement peu marqué, a donné naissance à des sols fertiles, exploités de longue date pour l'agriculture. Si le contexte pédologique est en réalité plus contrasté (Aillot et Verbeque, 1995), la Beauce n'est est pas moins une région agricole largement dominée par les cultures végétales, et notamment par les céréales.

Une étude réalisée en 1999 dans le cadre du plan d'action de Ouarville a permis de brosser un tableau des assolements pratiqués dans le secteur (Deschamps, 1999). Une enquête est aussi réalisée tous les ans par la Chambre d'Agriculture d'Eure-et-Loir pour suivre les emblavements et les pratiques de désherbage, mais ces données ne sont pas utilisées ici.

Deux tiers des surfaces sont occupées par des céréales, dont deux-tiers sont consacrés au blé tendre d'hiver, un peu plus de 10 % au maïs, un peu moins de 10 % à l'orge d'hiver (escourgeon), et environ 5 % à l'orge de printemps. Entre 18 et 20 % sont occupés par des oléo-protéagineux (pois protéagineux, colza). La culture de la pomme de terre est aussi importante sur les secteurs qui peuvent être irrigués, dans les sols avec une faible charge en éléments grossiers (Deschamps, 1999).

4 Contexte géologique

■ 4.1 Géologie et hydrogéologie de la Beauce

• Le calcaire de Beauce

La Beauce – au sens géologique du terme – correspond à l'étendue d'une formation géologique calcaire²⁰ (aire tertiaire), installée dans une vaste dépression de la craie (aire secondaire). Après le dépôt marin de la craie (terminé au Sénonien), le retrait de la mer annonce un épisode continental qui provoque une altération superficielle de la craie, aboutissant à la formation d'un niveau d'argile résiduelle à silex. Au tertiaire, la zone connaît une succession de transgressions (avancées de la mer) et de régressions (retrait de la mer), et se trouve donc alternativement en situation de mer peu profonde, de lagune, de lacs ou d'embouchure de fleuves et de rivières. Cet épisode provoque le remplissage de la dépression par les dépôts calcaires cités cidessus, ainsi que par quelques formations intercalaires (marnes, molasses du Gâtinais, marnes et sables de l'Orléanais...). Après les dernières transgressions, à la fin des épisodes de glaciation du quaternaire, un dépôt limoneux éolien peu épais a recouvert une bonne partie du calcaire (Lorain *et al.*, 1973).

■ La nappe de Beauce

Le calcaire comme la craie sont des formations poreuses, ayant une perméabilité importante. Sous l'effet de la dissolution et des contraintes tectoniques, le calcaire est souvent parcouru par un vaste réseau de fissures (karst). À l'exception de la partie sud

²⁰ Les calcaires de Beauce, au sens large.

(orléanaise) de la Beauce, le calcaire n'est recouvert d'aucune formation imperméable. Les pluies efficaces peuvent donc s'infiltrer librement. Les argiles de décarbonatation constituent une assise imperméable à la base du calcaire, et s'étendent sur une partie importante de la Beauce.

Ces conditions favorables font du calcaire un immense réservoir d'eau souterraine. La craie sous jacente constitue un deuxième réservoir, partiellement isolé du premier par les argiles à silex. Le réservoir calcaire est caractérisé par une grande hétérogénéité des formations qui le composent, que ce soit par leur extension latérale ou par leur nature lithologique. Ces hétérogénéités, combinées au réseau karstique, rendent les études hydrogéologiques complexes et incertaines. C'est une des raisons pour lesquelles les approches 'agro-pédologiques' et les approches 'géologiques' des pollutions des nappes phréatiques par les produits phytosanitaires sont généralement traitées séparément : il est difficile de connecter des concentrations en pesticides mesurées à la base du sol avec des concentrations observées dans la nappe sous-jacente, à grande échelle (Lorain, 1973).

La nappe des calcaires de Beauce s'étend ainsi sur une superficie 9000 km^2 , à cheval entre les bassins versants / unités de gestion des agences de l'eau 'Seine-Normandie' et 'Loire-Bretagne'. Il s'agit d'un des plus importants réservoirs d'eau souterraine de France.

· · · · ·	<u> </u>		<u> </u>	<u> </u>		
Age –M.A.	Ere	Système	Epoque	Etage	Formation / contexte	Abr.
		Paléogène	Oligocène	_	dernière transgression	
23.3-21.5	III ^{aire}	Néogène	Miocène <	Aquitanien <	Marne de Voise, calcaire de Berchères	m1a1
23.3-21.5	III ^{aire}	Néogène	Miocène <	Aquitanien >	Calcaire de Beauce	m1a2
21.5-16.3	III ^{aire}	Néogène	Miocène <	Burdigalien	période aride = assèchement	
21.5-16.3	III ^{aire}	Néogène	Miocène <	Burdigalien	Sables de Lozère = climat plus humide	m1b
	III ^{aire}	Néogène	Pliocène	_	pénéplanation par érosion = relief actuel, climat tiède et humide	
				Glaciation		
?	IV ^{aire}	?	?	?	gélifraction des 1 ^{ers} mètres du calcaire de Beauce	
0.08-0.01	IV ^{aire}	Néogène	Pléistocène >	Würm	Limon des plateaux	LP

■ 4.2 Contexte géologique local

tableau 9 – Récapitulatifs des formations géologiques présentes sur le secteur de Ouarville, d'après la carte géologique de Voves.

Les indications d'étages et de contexte géologique sont tirées de la notice de la carte géologique. Avec M.A. : millions d'années ; Abr. : abréviations ; III^{aire} : tertiaire ; IV^{aire} : quaternaire.

La carte géologique de Voves (au 1/50 000) fait apparaître plusieurs formations géologiques dans le secteur agricole étudié. Ces formations, ainsi que les principaux évènements de l'histoire géologique du secteur, sont résumées dans le tableau 9 cidessus.

La marne de Voise et le calcaire de Berchères (m1a1) sont deux formations de l'Aquitanien inférieur se présentant soit sous forme d'un calcaire dur, soit sous forme d'une 'marne friable blanche' (cette dernière n'a pas été rencontrée sur le site). Il s'agit d'une « pierre dure et compacte : calcaire très fortement vacuolaire (vacuoles presque jointives), d'aspect carié, noduleux, <u>plus ou moins silicifié, brun rosé clair à ocre</u> »

J. Moeys | Partie II

(Gigot et Desprez, 1976, notice). Un faciès calcaire rosé et ocre a effectivement été identifié, parfois fortement meuliérisé (silicifié), lors de l'ouverture des fosses pédologiques sur la parcelle étudié (INRA d'Orléans, 2004), au bas du flanc 'est' du talweg qui traverse cette dernière. La notice de la carte géologique précise que cette formation « peut se charger en grains de sables détritiques allant jusqu'à constituer des lentilles de sables quartzeux ».





La signification des symboles est donnée dans le tableau 9 ci-dessus. La carte géologique est un extrait de la carte géologique de Voves (Gigot et Desprez, 1976). La seule plage de formation FC (hachures vertes horizontales, <u>Formations Colluviales</u>) du secteur est en fait masquée par la zone urbanisée autour de Santeuil. Les hachures vertes verticales représentent les zones boisées. Digitalisation et infographie J. Moeys.

Le **calcaire de Beauce** (m1a2) est une formation de l'Aquitanien supérieur pouvant se présenter (depuis son sommet jusqu'à sa base) sous la forme d'un « calcaire gélifracté », puis d'un « calcaire gris fer [...] », puis d'un « calcaire gris bréchique, à nodules [...] », puis d'un calcaire « blanc-beige, carié [...], et enfin d'un « calcaire beige rosé uni » (Gigot et Desprez, 1976, notice). Du calcaire blanc, et plus rarement gris (sous forme d'éléments grossiers), a effectivement été rencontré lors des campagnes de sondage tarière (prospections Moeys J. et Michelin J.). Le faciès calcaire gris semble localisé sur le plateau autour de Ouarville. La notice de la carte géologique précise qu' « un réseau karstique important avec de nombreux avens » s'y est installé.

De nombreux avens, de petite taille et présentant une faible dépression (20 à 100 cm, parfois plus), sont en effet observables dans le secteur étudié.

Les **Sables de l'Orléanais, Sables de Lozère** (m1b) du Burdigalien n'existent qu'en « lentilles témoins » sur le secteur. Des matériaux sableux ont effectivement été rencontrés lors de deux sondages distants, en remplissage d'un aven, sous une épaisse couche de limon. Les 'graviers de Lozère', graviers blancs ou rosés, de nature siliceuse (ou de feldspath potassique ?) ont été rencontrés plus fréquemment, soit sous forme de lentilles très localisée au-dessus du calcaire (rare), soit en quantité moyenne mêlés à une argile lourde (plus fréquent), soit en faible quantité dans le limon (fréquent). Il n'est pas rare que ces derniers soient enrobés d'une pellicule brun sombre à noire, évoquant d'une hydromorphie passée.

Le **limon des plateaux** (LP) est « très homogène, d'une teinte brune à brun-jaune ou brun roux » très peu calcaire [...] et très fin. ». La notice de la carte géologique précise aussi que « les analyses de la fraction argileuse reflètent la nature du substratum ».

Formation	Superficie	Surface
LP	2371 ha	78,8%
m1a2	306 ha	10,2%
m1a1	178 ha	5,9%
hors carte	138 ha	4,6%
LP m1b	17 ha	0,6%
FC	1 ha	0,0%
TOTAL	3010 ha	100,0%

tableau 10 – Surface occupée par les différentes formations géologiques.

Hors carte : Autre carte géologique, non utilisée pour limiter les problèmes possibles de jointures entre les deux cartes. Les formations colluviales (FC) ne sont pas abordées dans ce document vu leur faible étendue.

La carte géologique ne fait pas mention des formations de faible épaisseur qui ont été rencontrées localement dans le secteur étudié : **l'argile à meulières** et l'**argile de décarbonatation**. Elles dérivent probablement toutes deux de la décarbonatation du calcaire, la première à partir d'une formation contenant des meulières ou silicifiée, la seconde à partir d'une formation exempte de meulières.

Une étude réalisée par le bureau d'étude ANTEA en mai 1999 (citée par Deschamps, 1999) évalue le **niveau de la nappe phréatique** entre 127 mètres, au niveau de Santeuil, et 122 mètres, au niveau de Ouarville, avec un gradient de piézométrique du nord-ouest au sud-est (altitude absolue du toit de la nappe, ce qui donne une nappe située entre 18 et 30 mètres sous le niveau du sol).

5 Contexte pédologique

5.1 Carte des sols du secteur réalisée par un bureau d'étude indépendant

En 2000, une carte des sols a été réalisée par un bureau d'étude indépendant pour servir de base au plan d'action en cours sur le secteur de Ouarville (réduction des pollutions par les produits phytosanitaires).





La carte a été établie par un bureau d'étude (Cabinet Veillaux, 2000). Digitalisation: J.-M. Gilliot, infographie : J. Moeys. Initialement indiqués d'après la classification CPCS (CPCS, 1967) les types de sols ont été convertis en types 'RP 1995' (AFES, 1995). Les types de sols sont subdivisés en unités cartographiques élémentaires d'après les classes de profondeur de sol, dont seules les limites sont représentées ici. Les courbes isovaleurs grises représentent le fond topographique IGN.

Les types de sol de la carte initiale (d'après la classification CPCS) ont été convertis en types de sol d'après le Référentiel pédologique de 1995. Pour les types de sol présents, la conversion peut se faire (quasiment) sans ambiguïté, comme indiqué par le tableau 11 ci-dessous.

Classification CPCS	Référentiel Pédologique 1995
RENDZINE (BLANCHE OU GRISE ?)	RENDISOL (OU RENDOSOL)
SOL BRUN CALCAIRE	CALCOSOL
SOL BRUN CALCIQUE	CALCISOL
SOL BRUN	Brunisol
SOL BRUN LESSIVÉ	NÉOLUVISOL
SOL LESSIVÉ	LUVISOL

tableau 11 – Règles de conversion utilisées pour passer des types de sol de la classification CPCS à ceux du Référentiel pédologique 1995.

Type CPCS	Type RP	Superficie	Surface
Rendzine	RENDOSOL OU RENDISOL	32 ha	1,2%
BRUN CALCAIRE	CALCOSOL	231 ha	8,6%
BRUN CALCIQUE	CALCISOL	166 ha	6,2%
Brun	BRUNISOL	139 ha	5,2%
Brun lessivé	NÉOLUVISOL	1289 ha	48,2%
LESSIVÉ	LUVISOL	816 ha	30,5%
TOTAL		2675 ha	100,0%

Les surfaces et proportions de la surface totale occupées par chacun des types de sol sont données par le tableau suivant.

tableau 12 – Surface occupée par les différents types de sol sur la carte. D'après Delmas (2007).

Les sols à 'ambiance calcaire ou carbonatée' (saturation de la CEC par le calcium, réserve de CaCO₃ plus ou moins abondante, sous forme d'éléments grossiers), c'est à dire les RENDOSOLS/RENDISOLS, CALCOSOLS et CALCISOLS occupent à peine 16 % des surfaces du secteur. Les RENDOSOLS/RENDISOLS, peu épais et développés principalement dans un matériau calcaire occupent moins de 2 % des surfaces.

Les BRUNISOLS, qui sont normalement les sols précurseurs des NÉOLUVISOLS et LUVISOLS occupent à peine 6 % de la surface.

Les NÉOLUVISOLS, correspondent à une phase de pédogenèse intermédiaire entre les BRUNISOLS et les LUVISOLS. Ils occupent à l'inverse presque la moitié de la surface, les LUVISOLS occupant les 30 % restants.

On remarque une relation ténue mais claire entre la topographie, la géologie et les types de sols. Les extrémités du secteur sont entaillées de talwegs naissants, notamment au 'nord-est', et au 'nord-ouest' du secteur étudié. La carte géologique indique, dans ces talwegs, la présence à faible profondeur²¹ des formations géologiques m1a1 et m1a2. C'est dans ces mêmes secteurs que l'on retrouve généralement les RENDOSOLS/RENDISOLS, CALCOSOLS et CALCISOLS. Mais ces derniers se retrouvent aussi à d'autres endroits, sous la commune d'Edeville ou au-dessus d'Ensonville. Les NÉOLUVISOLS et LUVISOLS occupent préférentiellement le plateau de Ouarville, là où les pentes sont les plus faibles. La carte géologique indique la présence d'une formation de limon des plateaux plus épaisse sur ces points hauts.

La carte pédologique renseigne aussi sur les profondeurs de sol, l'hydromorphie et les matériaux géologiques parentaux. Pour ces derniers, seuls le limon et le calcaire sont indiqués. L'hydromorphie des sols est généralement faible ou nulle²².

Les études réalisées en 2004 sur le secteur dans le cadre du programme ESHEL (Moeys, 2004 ; Moeys *et al.*, 2006), puis une campagne de sondages tarière réalisée en 2005 (prospection Moeys & Michelin, *non publié*), ont permis de mettre en évidence la présence d'autres matériaux géologiques parentaux non indiqués par la carte des sols. Il s'agit de l'argile à meulière et de l'argile de décarbonatation. Ces deux formations ne sont pas représentées sur la carte géologique, mais sont présentées dans la notice. Si ces formations sont morphologiquement semblables à un horizon

²¹ Les cartes géologiques ne représentent pas systématiquement les formations géologiques de surface. Si celles-ci ont une trop faible épaisseur, c'est la formation sous jacente qui est représentée. Ainsi, le limon des plateaux n'est représenté que s'il dépasse une certaine épaisseur (le seuil étant décidé par le géologue cartographe).

 ²² Les campagnes de sondages réalisées ont confirmé la rareté des phénomènes d'hydromorphie. Ceuxci sont vraisemblablement rares et liés à des épisodes particulièrement pluvieux (n'ayant pas lieu tous les ans). Certains indices d'hydromorphie sont aussi des reliques d'un climat passé.

d'accumulation d'argile (BT)²³, il n'est pas certain qu'elles soient identiques du point de vue de leur fonctionnement hydrique, ni de leur réactivité vis-à-vis des polluants organiques.

Les sols développés dans l'argile à meulière, ou sur une argile de décarbonatation peuvent être classés comme PSEUDO-LUVISOLS ou comme LUVISOLS (voir NÉOLUVISOLS). Il est difficile d'arrêter un choix avec les seules données de terrain, et il est possible que ces sols soient souvent des inter-grades de ces types de sols (situations intermédiaires ou combinaison de facteurs).

Après l'échantillonnage de l'étude présentée ici, Delmas (2007) a effectué une synthèse des données disponibles sur les sols du secteur, et évalué la précision de la carte présentée ci-dessus. Cette étude confirme les manques de cette carte.

∎ 5.2	pédologiques de la carte						
Ro/Ri	Ca	Ci	В	Ν	N _T	L	L _T
LA _{CA/CI}	LA _{CA/CI}	LA _{CI}	LAs	LA_E	LA _{BT}	LA _E	LA _{BT}
C _{CA}	S _{CA}	S_{CI}	(S)	(E)	(BT)	(E)	(BT)
	C _{CA}	C _{CA}	C*	BT	(S)	BT	(S)
				(S)	C_*	(S)	C*
				C		C	

rizono porostáristiques dos turos

tableau 13 – Horizons caractéristiques des types pédologiques représentés par la carte des sols du secteur.

Légende du tableau 13 ci-dessus. Ro ou Ri : RENDOSOLS ou RENDISOLS ; Ca : CALCOSOLS ; Ci : CALCISOLS; B: BRUNISOLS; N: NÉOLUVISOLS; L: LUVISOLS; Le symbole T signifie que la partie supérieure du sol, l'horizon éluvial E, a été tronquée (par érosion). LA : horizon travaillé (L), organo-minéral (A); C : horizon minéral dont le matériau parental a subi une fragmentation et/ou une altération géochimique, mais sans structuration pédologique. Pour le diagnostique du type de sol, le dernier horizon peut aussi être un horizon M (roche meuble) ou R (roche dure). L'indice CA désigne un horizon 'calcaire', avec plus de 5% de CaCO₃, et une CEC largement dominée par le cation Ca^{++} (saturé). Le diagnostique alternatif de terrain est une effervescence généralisée à froid à HCl. L'indice CI désigne un horizon 'calcique', avec moins de 5% de CaCO₃, et une CEC dominée par le cation Ca^{++} (sub-saturé). Le diagnostique alternatif de terrain est une effervescence localisée, ou de faible intensité, à froid au HCl. L'indice '*' désigne un horizon calcaire, calcique ou non calcaire. S: horizon structural, ayant subi une altération et une structuration pédologique, mais pas de départ (de réception) de matière vers (depuis) les horizons inférieurs (supérieurs). E : horizon éluvial, ayant perdu une partie de son argile par lessivage vers les horizons sous-jacents; BT : horizon illuvial, ayant reçu de l'argile par lessivage depuis un horizon supérieur. Les parenthèses autour de certains types d'horizons signifient que le type peut être présent mais n'est pas indispensable au diagnostique.

Il est important de rappeler quels sont les types d'horizon présents qui permettent de diagnostiquer un type de sol. Lors d'un travail de terrain comme celui réalisé pour la carte des sols, on ne dispose pas d'analyses physico-chimiques permettant de réaliser un diagnostique certain du type de sol.

Dans le secteur étudié, les principaux éléments sur lesquels reposent le diagnostique sont donc (A) l'effervescence à froid à HCl et/ou la présence non anecdotique (c'est-à-dire ne provenant pas d'un chaulage) d'éléments grossiers calcaires dans le sol et (B) la présence dans le profil d'un contraste de texture, indice d'un possible lessivage d'argile d'un horizon vers un autre.

²³ La présence de graviers et cailloux de meulière est en revanche une différence morphologique notoire entre les horizons BT développés dans le limon et les horizons développés dans une argile à meulière.

Ce dernier point doit cependant être nuancé. Une teneur en argile très élevée peut être due à la présence d'argile de décarbonatation. Une teneur en éléments grossiers de meulières notable, associée à une teneur en argile plus élevée et une absence d'éléments grossiers calcaires peut être due à la présence d'argile à meulière. J. Moeys | Partie III

Partie III Matériels & méthodes

Évaluation des propriétés du sol, de l'adsorption et de la dégradation de l'isoproturon.

1 Démarche générale

L'évaluation des risques de lixiviation d'isoproturon à la base des sols du secteur agricole de Ouarville doit reposer - dans cette étude - sur l'utilisation de modèles informatiques (programmes) qui simulent le comportement des molécules phytopharmaceutiques dans le sol. Le modèle choisi est un modèle à base physique, HYDRUS 1D. Ces modèles demandent d'être **paramétrés** en fonction des propriétés du sol, de la molécule et de leurs interactions.

Il est ainsi nécessaire de connaître les **propriétés hydriques du sol**, que ce soit la **rétention en eau** (relation entre teneur en eau θ et potentiel matriciel h) ou la **conductivité hydraulique** du sol en régime non saturé (elle aussi exprimée en fonction du potentiel h, et notée K(h)). Des **propriétés physiques et physicochimiques** du sol, comme sa masse volumique apparente et sa granulométrie sont aussi généralement mesurées. La teneur en carbone organique est un paramètre essentiel pour comprendre les propriétés d'adsorption des pesticides dans les sols.

Les propriétés physico-chimiques de la molécule seule, comme sa solubilité dans l'eau, ne sont généralement pas mesurées (et ne le sont pas ici), mais peuvent être renseignées d'après la littérature et les bases de données de propriétés des molécules phytopharmaceutiques comme AFSSA (2007) ou FOOTPRINT (2006).

Les propriétés résultant de l'interaction entre la molécule et le sol doivent être mesurées. Elles sont en effet très dépendantes des propriétés du sol dans lequel se trouve la molécule. Ces propriétés sont principalement le **coefficient d'adsorption** de la molécule sur le sol (noté Kd ou Kf selon l'équation considérée) et la **cinétique de dégradation** de la molécule (synthétisée par son temps de demi-vie, DT50).

La connaissance exhaustive des propriétés du sol est déjà impossible sur un échantillon simple et restreint (ex : un agrégat), elle l'est plus encore au niveau spatial, que ce soit à l'échelle du profil de sol ou celle du bassin versant. La connaissance des sols à l'échelle d'un secteur agricole passe donc obligatoirement par une étape d'échantillonnage et de mesures des propriétés du sol sur des sites localisés. Ce n'est qu'une fois ces mesures acquises que l'on peut envisager de les 'spatialiser'.

Après la phase de mesure, et avant l'étape de spatialisation, il est aussi important d'identifier les propriétés du sol qui sont déterminantes pour l'interaction entre le sol et la molécule, ou pour les propriétés hydriques du sol. Des tests statistiques permettent de mettre en évidence ces liens. La connaissance de ces interactions est déterminante pour expliquer la variabilité spatiale des propriétés importantes, et éventuellement pour choisir la meilleure stratégie de spatialisation de ces dernières.

L'objet de cette partie est de décrire précisément cette étape d'échantillonnage et de mesures, puis les tests statistiques destinés à mettre en évidence d'éventuels liens entre les différentes propriétés mesurées.

2 Plan d'échantillonnage

■ 2.1 Nombre d'échantillons

La taille de l'échantillonnage a été arrêtée à **50 échantillons** pour une campagne (année culturale) de prélèvement et de mesure. Le **facteur le plus limitant** est le

nombre d'incubations sol-pesticide qu'il est possible de gérer simultanément pour les **mesures de cinétique de dégradation de l'isoproturon**. Seuls 50 incubations peuvent être gérées simultanément. A raison de 2 répétitions par échantillons de sol à étudier, une série de mesure de dégradation de l'herbicide ne peut concerner que 25 échantillons. Il est possible de réaliser 2 séries de mesures successives (lancées à quelques semaines d'intervalle) au cours d'une campagne de prélèvement. Cela ramène le nombre d'échantillons maximum à 50 par campagne.

D'autres campagnes de prélèvements et de mesures n'ont pas été possibles du fait du temps nécessaire aux mesures en laboratoire et sur site.

■ 2.2 Stratification verticale

Comme exposé dans la bibliographie ("*Stratification verticale et latérale de l'horizon travaillé : le profil cultural*", p. 36), les opérations de travail du sol provoquent une stratification latérale et verticale de l'horizon travaillé, ainsi qu'une hétérogénéité interne des 'strates' du profil.

Ces hétérogénéités se traduisent en terme de masse volumique apparente du sol (des mottes) et de localisation des résidus organiques de la récolte précédente. Or les variations de masse volumique apparente reflètent *de facto* des variations de porosité du sol, paramètre déterminant pour la rétention en eau et la conductivité hydraulique. Les matières organiques sont quant à elles capitales pour l'adsorption des molécules organiques comme l'isoproturon.

Il est donc *a priori* important de prendre en compte l'hétérogénéité du profil dans le plan d'échantillonnage. Deux limitations majeures sont à prendre en compte : le nombre d'échantillon à prélever est limité (50), et l'ouverture d'un profil cultural et sa description est un travail long et fastidieux, difficilement compatible avec les impératifs de temps liés aux mesures à réaliser *in situ*. Le travail s'effectue en effet en deux phases: une phase d'échantillonnage et une phase de mesure *in situ*, la première en automne, la seconde en hiver et au printemps.

Il est par contre aisé de déterminer la profondeur du lit de semence et celle du reste de l'horizon travaillé, en réalisant un trou à la bêche (et en le complétant au besoin par un travail au couteau). Cette stratification verticale est d'autant plus importante que, dans le secteur, environ un tiers des surfaces cultivées sont en travail simplifié, ce qui provoque l'apparition d'un 'mulch' (*paillis*) de débris organiques en surface et une concentration de la matière organique dans les premiers centimètres du sol.

Seule la stratification verticale lit de semence – reste de l'horizon travaillé a donc été prise en compte. La répartition choisie est 2/3 d'échantillons pour le lit de semence, et 1/3 prélevés dans le reste de l'horizon travaillé. Le lit de semence est plus important, car il reçoit le pesticide en premier et il contient plus de matières organiques si le sol est en travail simplifié.

La stratification consiste donc en 34 sites de prélèvement. Les lits de semence de ces sites ont été systématiquement prélevés, ce qui donne 34 échantillons de ce type. Le reste de l'horizon travaillé n'a été échantillonné que pour 16 des 34 sites, ce qui donne 16 échantillons supplémentaires, pour arriver à un total de 50.

Dans le but d'éviter toute ambiguïté, le sens des termes 'site', 'couche de sol' et 'échantillon', tels qu'utilisés dans ce document, est défini dans la partie « *Termes relatifs à l'échantillonnage* », (annexes p. 276).

■ 2.3 Éléments utilisés pour la stratification

Principe

Le plan d'échantillonnage a été stratifié en suivant plusieurs éléments d'information déjà disponibles pour le secteur étudié : le **type de sol** et sa **classe de profondeur**, d'après la carte pédologique ; le **substrat géologique** d'après la carte géologique ; la **classe de clarté** du sol issue d'une image satellitale. La **distance moyenne** entre les sites d'échantillonnage a aussi été prise en compte afin d'obtenir un échantillonnage relativement homogène géographiquement.

Les objectifs de l'échantillonnage pour chaque classe des différentes propriétés est donnée en annexe (« Stratification de l'échantillonnage : objectifs », p. 280), ainsi que la pondération entre ces différents critères.

Le type de travail du sol de l'exploitant (informations sur le parcellaire et enquête de la Chambre d'Agriculture d'Eure-et-Loir ; Sallé S., 2004-2007, *communications personnelles*) a été pris en compte dans un second temps (empiriquement), lors de la sélection des 34 sites parmi les 44 échantillonnés. Le suréchantillonnage permet d'ajuster après coup les caractéristiques de l'échantillonnage.

L'information portée par ces strates est sous forme de propriétés qualitatives, issues de typologie. L'opération de stratification consiste à choisir les sites d'échantillonnage de manière à ce que, pour chaque strate, les sites se répartissent correctement entre les différentes valeurs possibles des propriétés qualitatives existantes.

Une première étape de la stratification consiste à définir propriété par propriété (type de sol, formation géologique, *etc.*), et valeur par valeur (LUVISOLS, NÉOLUVISOLS, *etc.*) le nombre d'échantillons qui doit s'y rattacher (ou la proportion d'échantillons).

Comme plusieurs strates d'information sont considérées simultanément, et que ces strates peuvent avoir des liens entre elles (sol et géologie par exemple) il n'existe pas forcément de solution parfaite en regard des objectifs fixés (en terme de répartition).

Les jeux d'échantillons 'possibles' ont donc été notés, pour chaque strate, en fonction de l'adéquation entre l'échantillonnage proposé et l'objectif visé.

Cette stratification a été effectuée en 3 étapes :

- Établissement d'une grille systématique de localisation géographique, réparties de manière régulière, espacées de 50 m (en X et Y). Cette grille de coordonnées géographiques en Lambert 1 a été générée avec le logiciel Statistique R (R Development Core Team, 2007), puis a été importée dans le Système d'Information Géographique ArcMap (ESRI, Redlands, CA, USA) via une table MS Access (Microsoft, WA, Redmont).
- Élimination des localisations géographiques se trouvant sur ou à proximité d'éléments anthropiques ou non-agricoles. Une base de données géographiques au format vectoriel (ArcMap) a été constituée à cette fin en digitalisant la carte IGN du secteur et en la complétant par une analyse fine d'images satellitales récentes du secteur. Les éléments de cette base considérés comme anthropiques sont :
 - Les zones urbaines (villes et jardins alentours) ;
 - Les voies de communication actuelles (routes et chemins agricoles) ;
 - Les chemins agricoles anciens, effacés par les remembrements successifs, repérés sur les images satellites et les photos aériennes, certaines prises il y a plusieurs décennies;

- Les zones boisées actuelles ;
- Les zones boisées anciennes ou mises en culture depuis, repérées sur la carte IGN et les photos aériennes ;
- Les haies qui bordent certaines parcelles, repérées sur les images satellitales ;

Les informations au format vectoriel 'ligne', comme les routes et chemins, ont ensuite été transformées en couches vectorielles 'polygone' à l'aide d'une zone tampon de 10 m minimum autour de leur tracé.

L'ensemble des couches de données 'non-agricoles' a ensuite servi de masque pour éliminer de la grille des localisations géographiques initiales celles situées trop près d'éléments anthropiques.

La grille comporte, après élimination des sites anthropisés, 8780 points.

Réalisation

La sélection préalable des sites à échantillonner a été effectuée par un script en langage R, incluant une procédure itérative simple visant à choisir les sites par des tirages aléatoires successifs.

Un premier sous-ensemble de 44 sites est constitué par un tirage aléatoire dans le jeu de localisations initiales (grille).

Les écarts aux objectifs (types de sol, classe de profondeur...) sont calculés critère par critère, moyennés sur l'ensemble des classes de chaque critère. Une moyenne pondérée entre les critères permet d'obtenir un score global pour la sélection de 44 sites évalués.

Le sous-ensemble est modifié pas à pas, en éliminant à chaque étape un site, et en le remplaçant par un autre. Si le remplacement améliore le score global, le changement est validé ; dans le cas contraire, il est rejeté.

La procédure est arrêtée au bout de 3000 itérations et les sites retenus sont présentés sous forme d'un fichier comportant leur localisation géographique.

La procédure permet de préciser si des sites ont déjà été échantillonnés. Ces derniers font alors obligatoirement partie de l'ensemble de sites testés et le script retourne un nombre de sites supplémentaires permettant d'améliorer l'échantillonnage par rapport aux objectifs fixés.

La procédure est cependant difficile à mettre en œuvre au jour le jour, car les sites échantillonnés ne sont jamais exactement à la position des sites visés (il peut aussi s'agir de sites échantillonnés qui n'étaient pas visés initialement). Il est alors nécessaire d'extraire du SIG les caractéristiques des sites échantillonnés (type de sol supposé, classe de profondeur...). Cette procédure est relativement longue, car elle n'a pas été automatisée.

Adaptation aux conditions de terrain

Les principales modifications à la procédure d'échantillonnage décrite ci-dessus sont dues à la culture en place à la période de prélèvement. En effet, toutes les surfaces ne sont pas cultivées en céréale d'hiver, et la période de semis est très étalée. Si un site visité s'est avéré inadéquat, il a pu être remplacé par un site similaire (type de sol et géologie notamment).

Il s'est avéré nécessaire d'adapter le positionnement aux conditions de terrain : si le site visé est supposé être un sol calcaire (d'après la carte), et qu'il s'avère être un sol non caillouteux, le site est déplacé jusqu'à la zone calcaire la plus proche.

Les sites trop éloignés des voies d'accès ont été éliminés ou déplacés (si la distance est supérieure à 300 m) et certains sites ont été échantillonnés sans avoir été préalablement choisis.

2.4 Localisation géographique des sites – recherche des sites visés

La procédure de présélection des sites d'échantillonnage permet d'obtenir, pour chaque site visé, un couple de coordonnées (latitude et longitude, exprimées en Lambert 1 Carto) à atteindre.

Le système de positionnement utilisé est un 'Meridian GPS[®]' (Magellan Navigation Inc., Santa Clara, CA, USA). L'appareil à une précision d'affichage métrique, et une **précision effective de 5 à 10 mètres**, dans des conditions de nébulosité faible à modérée. L'appareil n'est <u>pas</u> équipé d'un système de positionnement différentiel (dGPS).

Les coordonnées des sites à échantillonner sont préalablement chargées dans la mémoire de l'appareil au moyen d'un programme approprié. La fonction 'Goto' de l'appareil permet ensuite à l'opérateur de connaître la direction du site et sa distance, à partir d'un lieu quelconque du secteur étudié, et de se déplacer jusqu'à celui-ci.

En pratique, il est difficile de positionner un site visé à une précision inférieure à un ou deux mètres. Une correction empirique de la localisation est parfois nécessaire pour s'adapter aux conditions de terrain (voir ci-dessus).

Le sol du site est ensuite échantillonné selon les modalités décrites ci-dessous. Pendant l'échantillonnage, le GPS est posé allumé le plus près possible de la zone prélevée. A la fin de l'échantillonnage, les coordonnées affichées par le GPS sont notées sur la fiche de prélèvement, ce qui permet de tenir compte d'une éventuelle correction/stabilisation des coordonnées affichées. Un bâtonnet de 1 m de haut, prolongé d'un 'drapeau' plastique blanc et orange est placé sur le point échantillonné.

Cette première géolocalisation détermine la localisation géographique du site, telle qu'elle est saisie dans la base de données des mesures, le site étant une aire virtuelle de quelques mètres carrés dans laquelle les mesures suivantes doivent théoriquement se trouver.

Pour les mesures réalisées à une date ultérieure à l'échantillonnage (sondages tarière, masse volumique apparente et infiltrométrie, prélèvement pour les mesures de rétention en eau), le site est localisé à nouveau à l'aide de la fonction 'Goto' du GPS et des coordonnées définitives du site préalablement chargées en mémoire. Compte tenu des erreurs cumulées de positionnement initial et ultérieur du site, les mesures sont théoriquement localisées dans un rayon de 11 à 21 mètres (5+5+1 ou 10+10+1) autour du site théorique. Le drapeau permet, quand il est encore visible, de retrouver le site exact (un certain nombre ont été mis à terre par les chevreuils...). Les sondages tarières (et parfois les mesures d'infiltration) ont été géolocalisées à nouveau et leurs coordonnées reportées sur la fiche de mesure.

Par sécurité, deux GPS étaient à disposition (toujours les mêmes), comportant tous deux les coordonnées des sites à prélever ou prélevés. Un seul des deux (sauf accident, toujours le même) était utilisé pour prendre et noter les coordonnées.

■ 2.5 Échantillonnage du sol : protocole

Les sols ont été échantillonnés à l'aide d'une bêche et d'une petite pelle. Pour l'échantillonnage du lit de semence, un carré de 20 cm sur 20 cm est délimité en

tranchant le sol avec la bêche. Sur une des faces du carré, du côté extérieur, le sol est excavé sur 10 à 15 cm et mis de côté. Cette opération, éventuellement complétée par un examen au couteau, permet de juger de la profondeur du lit de semence. La bêche est enfoncée parallèlement à la surface du sol, juste au-dessus de la limite inférieure du lit de semence, à l'intérieur du carré préalablement délimité. Le sol situé sur la bêche est prélevé à l'aide de la petite pelle, et mis dans un sac plastique hermétique de type 'Ziplock'.

Pour les prélèvements dans le reste de l'horizon travaillé, l'opération est identique, mais le lit de semence a été préalablement décapé sur une zone plus large que le carré de 20 cm de côté préalablement délimité, de manière à limiter les contaminations. Le sol du reste de l'horizon travaillé est prélevé sur 10 à 15 cm d'épaisseur, suivant la profondeur du travail du sol.

Le sac est dûment annoté avec : le numéro du site échantillonné, la limite supérieure et inférieure de la couche prélevée, la date, les coordonnées géographiques sur site telles qu'affichée par le GPS, et le nom de l'étude.

De retour du terrain, les échantillons ont été stockés dans une chambre froide à 4°C jusqu'à leur utilisation.

Une fiche de prélèvement est remplie, similaire à l'en-tête de la fiche de description des sondages tarière présentée en annexe (figure 97, p. 303), avec un descriptif des couches prélevées.



figure 20 – Photo illustrant le protocole de prélèvement (Site 20 037). Le trait pointillé illustre la zone prélevée.

Pour chacun des sites échantillonnés, la surface du sol a été photographie, afin de pouvoir reconstituer visuellement l'état de surface au moment du prélèvement. Une ardoise annotée, posée au sol, permet de connaître le numéro de site et les coordonnées de la photo.

■ 2.6 Résultats : stratification obtenue

Période et condition de prélèvement

Les échantillons ont été prélevés de la fin octobre (25/10/2005) à la fin novembre (22/11/2005). Les conditions météorologiques au début de cette période étaient très sèches. Les sols prélevés étaient donc à une teneur en eau assez basse (9 % à 29 %, en moyenne 18 % de teneur en eau massique). Ces conditions sèches ont retardé et étalé les opérations de labour et de semis des céréales d'hiver, les sols étant souvent trop secs pour être travaillés. Quelques épisodes pluvieux ont rendu les sols

beaucoup plus humides à la fin de la période de prélèvement.

Le temps sec a influencé notoirement la première phase de l'échantillonnage. Les prélèvements réalisés à cette période ont été réalisés dans les quelques parcelles déjà semées (et donc chez les quelques agriculteurs qui avaient semé à cette période).

État du sol et culture en place au moment du prélèvement

L'isoproturon étant une molécule utilisée notamment en prélevée sur les céréales d'hiver, seules des parcelles travaillées et récemment semées en céréales d'hiver ont été prélevées. Au moment du prélèvement, la céréale était (au maximum) au stage de la germination ou de la levée. Des contacts avec les agriculteurs avant ou après le prélèvement ont permis de s'assurer que les parcelles retenues n'avaient pas reçu d'isoproturon au moment du prélèvement (pour cette saison culturale). Pour cette même raison, il était plus difficile de réaliser les prélèvements en fin d'hiver, pendant la période où l'isoproturon est utilisé en 'rattrapage' ou complément des désherbages d'automne. Dans cette configuration, il aurait été plus difficile de prélever des parcelles n'ayant pas reçu d'application de la molécule.





Localisation géographique des sites prélevés

La figure 21 présente la répartition géographique des échantillons dans le secteur agricole.

La répartition 'géographique' des sites échantillonnés n'est pas parfaitement homogène. Le secteur 'nord-est' comporte plus d'échantillons (14 sur 34), mais cela s'explique par le fait que les sols peu profonds et calcaires sont plus abondants dans ce secteur. Comme la stratification visait à obtenir au moins un nombre minimal de sols calcaires (« Stratification de l'échantillonnage : objectifs », p. 280), il est normal que le secteur soit surreprésenté.

Sept sites sont dans le secteur 'nord-ouest', 5 sites dans le secteur 'sud-ouest' et 8 sites dans le secteur 'sud-est'.





Les deux graphiques (droite et gauche) partagent la même échelle des ordonnées.

La figure 22 montre que la distance des sites à leur plus proche voisin est conséquente. Cette dernière est en effet au minimum de 246 mètres (sites 20 001 et 20 002), et au maximum de 1 196 mètres, avec une moyenne de 526 mètres environ. Ces chiffres peuvent paraître surprenants, car le secteur agricole étudié ne mesure 'que' 5 kilomètres sur 5 kilomètres. Par comparaison, la distance au site le plus proche d'un échantillonnage selon une grille régulière et systématique, avec 36 sites (6 x 6), serait de 757 mètres. La distance moyenne au site le plus proche est donc inférieure de 30 % à celle d'un échantillonnage systématique, ce qui représente un bon compromis compte tenu de la double contrainte d'un échantillonnage relativement aléatoire et stratifié selon plusieurs facteurs (facteurs répartis de manière hétérogène dans le secteur étudié).

Stratification par rapport au type pédologique indiqué par la carte de sol

	R	Ca	Ci	В	NL	L
nombre	1	7	5	2	11	8
	3%	21%	15%	6%	32%	24%

figure 23 – Répartition des sites étudiés par rapport au type de sol indiqué par la carte de sol du secteur.

Avec R : Rendosols ; Ca : Calcosols ; Ci : Calcisols ; B : Brunisols ; NL : Néoluvisols ; L : Luvisols.

Les RENDOSOLS, CALCOSOLS et CALCISOLS sont deux à trois fois plus abondants dans les sites échantillonnés que la proportion de surface qu'ils occupent dans le secteur étudié d'après la carte des sols. Les BRUNISOLS sont représentés dans les mêmes proportions que la surface qu'ils occupent, tandis que les NÉOLUVISOLS et les LUVISOLS sont sous-représentés (-16 % et -6 % respectivement par rapport aux surfaces indiquée par la carte des sols, tableau 12, p. 83).

Stratification par rapport au type de travail du sol

Vingt-quatre sites sont situés dans des parcelles gérées en travail du sol conventionnel, et les 10 autres sont en travail du sol simplifié.

L'échantillonnage respecte globalement des proportions de surface occupées par les deux modalités de travail du sol rencontrées sur le secteur : travail du sol conventionnel, avec labour et retournement de l'horizon de surface (2/3 de la surface) et travail du sol simplifié, sans labour (1/3 de la surface).

Stratification par rapport à la géologie

	LP	m1a1	m1a2	FC	LP m1b	autre
nombre	23	5	6	0	0	0
	68%	15%	18%	0%	0%	0%

figure 24 – Répartition des sites étudiés par rapport à la formation géologique indiquée par la carte géologique du secteur.

Les symboles sont ceux utilisés pour la figure 18 p. 80.

Les formations m1a1 et m1a2 sont surreprésentées dans les sites échantillonnés (proportion trois fois plus élevée que la surface occupée dans le secteur), mais cela permet de disposer d'un nombre suffisant d'échantillons prélevés dans des sols (théoriquement) développés sur un matériau calcaire à faible profondeur.

Nombre d'exploitants agricoles concernés par les prélèvements

Les 34 échantillons ont été prélevés sur des parcelles (généralement différentes) appartenant à **19 exploitants agricoles**, soit une moyenne de 1,8 échantillons par agriculteur. Le nombre maximum de sites prélevés pour les parcelles d'un même exploitant est de 6, et de 4 sites prélevés chez un second. Les deux exploitants concernés sont les seuls en travail simplifié et leurs parcelles occupent environ 1/3 des surfaces cultivées du secteur.

Le nombre relativement élevé d'exploitants agricoles inclut dans l'échantillonnage permet de s'assurer qu'un éventail 'large' de pratiques agricoles (itinéraires culturaux, gestion des résidus de culture, travail du sol...) est pris en compte (dans les limites du contexte agricole local).

3 Le sol : constituants et organisation

■ 3.1 Propriétés physico-chimiques des sols

Analyses physiques et physico-chimiques

La mesure des propriétés physiques et physico-chimiques du sol a été réalisée par le 'Laboratoire d'Analyse des Sols' (LAS) de Arras (unité de service de l'INRA).

Les méthodes employées sont les suivantes :

Intitu	ılé de l'analyse :	Méthode :
- SC	DL-0301 Taux d'éléments grossiers (terre	méthode 'INRA'
fin	e + graviers + cailloux).	
– SC	DL-0302 Granulométrie 5 fractions sans	NF X 31-107
dé	carbonatation.	
– SC	DL-0304 Granulométrie 5 fractions après	NF X 31-107
dé	carbonatation.	
– SC	DL-0405 Carbone (C) organique et azote	NF ISO 10694 & NF ISO 13878
(N	i) total.	
– SC	DL-0501 pH eau.	NF ISO 10390
- SC	DL-0504 Calcaire (CaCO ₃) total.	NF ISO 10693

tableau 14 – Méthodes et normes utilisées pour les analyses physico-chimiques des échantillons par le Laboratoire d'Analyse des Sols de Arras.

La méthode INRA de détermination du « Taux d'éléments grossiers (terre fine + graviers + cailloux) se base sur des limites de fractions un peu différentes de celles exposées dans Calvet (2003) ou dans la norme AFNOR X 31 003 (AFNOR, 1998*b*) : la terre fine est la fraction < 2 mm, les graviers vont de 2 mm à 5 mm et les cailloux ont une taille > 5 mm. Il ne s'agit donc que de deux sous-fractions de la catégorie 'graviers' des deux références citées ci-dessus.

La norme X 31-107, juillet 1983, décrit l'« analyse granulométrique par sédimentation – méthode de la pipette » (AFNOR, 2003). La norme NF ISO 10693, juin 1993 (X 31-105) décrit la « détermination de la teneur en carbonates – méthode volumétrique » sur un échantillon séché à l'air (AFNOR, 1995*a*). La norme NF ISO 10694 ; juin 1995 (X 31-409) décrit le « dosage du carbone organique et du carbone total après combustion sèche – analyse élémentaire » (AFNOR, 1995*b*). La norme NF ISO 13878, juillet 1998 (X 31-418) décrit la « détermination de la teneur totale en azote par combustion sèche – analyse élémentaire » (AFNOR, 1995*c*).

Les analyses ont été réalisées à partir de sous-échantillons de 500 g de sol <u>non</u> tamisés (mais séchés à l'air).

■ Masse volumique apparente au cylindre

□ Principe général de la mesure

La masse volumique apparente a été mesurée par la méthode au cylindre. La méthode consiste à prélever un échantillon de sol **non perturbé** à l'aide d'un cylindre d'acier biseauté dont le volume est connu avec précision. Le sol ainsi prélevé est placé dans un sachet hermétique, ramené au laboratoire, pesé, puis séché à 105°C durant 48 h afin d'évaporer toute l'eau présente, et pesé à nouveau.

Le volume total du sol prélevé est celui du cylindre utilisé pour le prélèvement. La dernière pesée du sol permet de connaître la masse de sol sec (masse de la phase solide ; la masse de la phase gazeuse étant négligeable). Ces deux paramètres permettent de calculer la masse volumique apparente du sol à l'aide de l'équation 2 (p. 31). La différence entre la première pesée (sol humide) et la seconde (sol sec) permet de connaître la quantité d'eau présente dans le sol au moment du prélèvement (masse de la phase liquide). Il est alors possible de calculer les teneurs en eau massique et volumique du sol au moment du prélèvement, avec l'équation 5 (p. 40). La masse volumique apparente du sol et les teneurs en eau sont des paramètres utilisés pour les calculs liés aux mesures d'infiltrométrie réalisés en même temps.

□ Protocole de mesure

Les masses volumiques apparentes ont été mesurées par la méthode au cylindre. Trois répétitions de mesures ont été effectuées par site (quelquefois moins), avec un prélèvement de 510 cm^3 et deux prélèvements de 100 cm^3 . La méthode est décrite en détail en annexe ('Masse volumique apparente au cylindre', p. 282)

3.2 Étude pédologique à l'aide de sondages tarière

Avant le sondage, le site est **repéré et géoréférencé** en suivant la procédure décrite dans le paragraphe « Localisation géographique des sites – recherche des sites visés », p. 91.

La topographie du site est décrite, la teneur en éléments grossiers de surface est évaluée, ainsi que l'état cultural du sol (systématiquement un sol travaillé et semé), et le stade de la culture éventuelle (systématiquement une céréale d'hiver semée et parfois germée).

Les sondages ont été réalisés au moyen de tarières de 8 et 5 centimètres de diamètre, et de 125 cm ou 120 cm de long. Au besoin, l'ajout d'une à deux rallonges a permis d'obtenir une hauteur de 220 cm environ.

La tarière est graduée tous les 10 cm. La profondeur du sondage est vérifiée régulièrement à l'aide d'un mètre pliant.

Tous les 10 cm d'enfoncement, la tarière est remontée, nettoyée de sa partie supérieure et latérale (contamination), et la carotte obtenue est déposée dans une gouttière en PVC graduée tous les 10 cm. La carotte est ouverte en 2 dans sa longueur, et un peu émottée en veillant à respecter les profondeurs.

Le sondage est mené jusqu'à un éventuel blocage ou jusqu'à la profondeur maximale autorisée par la tarière. En cas de blocage, 1 à 2 réplicats sont tentés à 1 mètre du premier sondage, afin de s'assurer que le blocage n'est pas accidentel.

L'opérateur note sur une fiche les éventuels contrastes de couleur ou de compacité qu'il perçoit lors de la réalisation du sondage, mais la description n'est entamée que lorsque le sondage est fini.

L'opérateur **délimite les horizons** à l'aide des différences de couleur, de teneurs en éléments grossiers ou autres indices pédologiques qu'il perçoit sur la profondeur du sondage. Les indications de compacité qu'il a pu retenir lors du sondage sont aussi utilisées (sous réserve qu'il ne s'agisse pas d'un front d'humectation ou de séchage), ainsi que les appréciations tactiles ressenties lors de l'émottage.

Chaque horizon est ensuite décrit. La description est portée sur une fiche spécifique (voir la figure 97, p. 303 en annexe du document). Les paramètres décrits sont :

- Les profondeurs des limites supérieure et inférieure de l'horizon ;
- L'état d'humidité de l'horizon (noyé, humide, frais, sec) ;
- La texture évaluée par des tests tactiles tels que décrits dans Baize et Jabiol (1995). Ces tests ont parfois été réalisés a posteriori, à partir d'échantillons de sol stockés dans des pédocomparateurs ('boites'), ce qui permet de réaliser les tests dans de meilleures conditions.
- La couleur de l'horizon. La couleur est évaluée visuellement par deux paramètres, la teinte ('couleur de base') et sa clarté ('du clair au sombre'). Ce dernier paramètre est difficile à distinguer de la pureté de la teinte ;
- L'effervescence à l'acide chlorhydrique (5 classes d'intensité) ;
- La présence éventuelle et l'abondance d'éléments grossiers, évaluée individuellement pour chaque nature lithologique présente (calcaire, meulières, graviers quartzeux);
- La présence éventuelle et l'abondance de taches d'oxydation et/ou de réduction ;
- La présence éventuelle et l'abondance de **concrétions**, ainsi que leur nature.

Sous la description des horizons, la profondeur maximale du sondage est reportée, avec les raisons de l'arrêt (blocage, volontaire, longueur maximale de la tarière atteinte). Le matériau dur sur lequel la tarière a bloqué est, dans la mesure du possible, décrit comme un horizon.

L'examen des caractéristiques de tous les horizons permet ensuite de déterminer :

- Le matériau parental de l'horizon: limon, argile à meulière, argile de décarbonatation ou calcaire altéré.
- Le type pédologique d'horizon de chacun d'eux. Celui-ci est reporté sur la fiche ;
- La profondeur du sol, c'est à dire la profondeur d'apparition d'un horizon du type C, M ou R ;
- Le type pédologique du sol, ou les types possibles si le sol est un inter-grade. Il faut noter que seul le type de sol 'le plus probable' a été utilisé dans les analyses statistiques.

Le type pédologique d'horizon et de sol est déterminé d'après le Référentiel pédologique de 1995.

De retour du terrain, la description des sondages a été saisie dans la base de données MS Access créée pour stocker et organiser les informations (cf. annexes 'Précisions sur l'organisation et la gestion des données', p. 286).

4

Les propriétés hydrauliques

Le fonctionnement hydrologique du sol est conditionné par deux caractéristiques interdépendantes : la rétention en eau et la conductivité hydraulique. Plusieurs couples d'équations existent pour décrire ces deux caractéristiques, avec un ou plusieurs paramètres communs aux deux équations. Les fonctions de Campbell (1974) ont été retenues pour cette étude. Elles comportent 3 paramètres pour la rétention en eau, θ_{SAT} , b et h_A , et 3 paramètres pour la conductivité hydraulique, K_{SAT} , b et h_A . Les deux paramètres b et h_A sont communs aux deux caractéristiques. La stratégie retenue consiste à estimer dans un premier temps les 3 paramètres de la rétention en eau, plus simple à mesurer, et dans un deuxième temps de déduire le dernier paramètre (K_{SAT}) de mesures d'infiltrométrie de terrain.

4.1 Détermination des paramètres de la rétention en eau sur des échantillons de sol

Les résultats concernant cette partie sont exposés p. 162.

Principe

La formule de Campbell (équation 13, p. 43) peut être reformulée :

$$\ln(\theta) = \ln(\theta_s) + b \cdot \ln(h_A) - \frac{1}{b} \cdot \ln(h)$$

équation 30 – Modèle de Campbell 1974, exprimé en $\ln(\theta) = f(\ln(h))$.

Avec θ la teneur en eau du sol au potentiel h; θ_s la teneur en eau à saturation; b et h_A deux paramètres de la fonction de rétention en eau de Campbell.

Sous cette forme, si on dispose d'une mesure de θ à saturation, ainsi que de deux mesures de θ à des potentiels suffisamment éloignés (pF2 et pF4,2 par exemple), une simple régression linéaire en $\ln(\theta) = f(\ln(h))$ sur les deux mesures $\theta(h; h\neq 0)$ permet de déduire le paramètre b ainsi que h_A .

En effet, b se calcule à partir de la pente égale à -1/b, puis h_A se calcule à partir de b et de l'ordonnée à l'origine égale à $ln(\theta) + b \cdot ln(h_A)$.

La méthode a été évaluée par Cresswell et Paydar (1996) avec 3 mesures de θ , **dont h = 0**. Les meilleurs résultats sont obtenus avec une régression sur h = -0,5 m et h = -150 m (pF1,7 et pF4,2 respectivement).

Pour cette étude, la relation teneur en eau / potentiel matriciel a été mesurée à : h = 0 m (saturation), h = -1 m (pF2) et h = -160 m (pF4,2).

Détermination de la teneur en eau à un potentiel donné avec une presse de Richard

La méthode de détermination de la relation entre teneur en eau et potentiel matriciel consiste à imposer successivement plusieurs potentiels matriciels connus à des échantillons de sol non perturbés, et à mesurer leur teneur en eau à chacun de ces potentiels. Partant d'un échantillon de sol saturé en eau, il est progressivement soumis à une pression d'air extérieur croissante, qui va chasser l'eau du sol jusqu'à ce que le potentiel de l'échantillon s'équilibre avec la pression de l'air imposée. Ainsi, quand on lui impose une pression d'air équivalente à une hauteur d'eau de 1 m, l'échantillon va

perdre une partie de son eau jusqu'à ce que son potentiel matriciel atteigne la valeur de -1 m ($\mathbf{h} = -1 \text{ m}$). Une fois l'équilibre atteint, la teneur en eau de l'échantillon est la teneur en eau au potentiel -1 m. L'opération est recommencée au potentiel $\mathbf{h} = -160 \text{ m}$.

Les appareils utilisés pour cette mesure sont deux « presses de Richards » (*en*: '*pressure plate extractors*') #1600 (5 bars) et #1500 (15 bars) (Soilmoisture equipment corp., Santa Barbara, CA, USA), connectées à un compresseur et contrôlées par un dispositif de régulation de pression de même marque (0700CG23), doté de manomètres (0 à 4 bars, gradué 0,02 bar ou 0 à 20 bars, gradué 0,1 bar).

□ Protocole de mesure

Le protocole de mesure de la teneur en eau à un potentiel donné avec une presse de Richards est exposé en annexe (« Mesure de la relation $\theta(h)$ – Presses de Richards », p. 284). Pour chacune des 50 couches de sol à caractériser, un seul prélèvement de sol non perturbé (49,1 cm³) a été réalisé pour la mesure de rétention en eau (<u>pas</u> de répétitions). Le résultat de ces mesures est utilisé pour déduire les paramètres h_A et b de l'équation 30 (θ_{SAT} étant mesuré directement).

■ 4.2 Détermination des paramètres de la conductivité hydraulique *in situ*

Les résultats concernant cette partie sont exposés p. 165.

Principe

Une fois les paramètres h_A et b déduits des mesures potentiel / teneur en eau exposées ci-dessus, il est possible d'estimer la conductivité hydraulique à saturation à partir d'<u>une</u> mesure de conductivité à un potentiel donné (potentiel nul ou légèrement non-saturé). L'équation 17, reformulée, permet en effet de calculer directement K_s :

$$K_{S} = K_{h} \cdot \left(\frac{h}{h_{A}}\right)^{+\left(2+\frac{3}{b}\right)} \quad \text{quand } h < h_{A}$$

et $K_{S} = K_{h} \quad \text{quand } h_{A} \le h < 0$

équation 31 – Estimation de K_s avec une mesure de K_h ($h \le 0$), en connaissant les paramètres h_A et b.

L'estimation de la conductivité hydraulique à un potentiel donné – destinée à calculer le paramètre K_s – est l'objet des paragraphes suivants. Cette estimation de K(h) a été réalisée par l'intermédiaire d'une mesure *in situ* d'infiltrométrie monopotentiel non-saturée (h = -1 cm).

Détermination de la conductivité hydraulique au voisinage de la saturation avec un infiltromètre à disque

La mesure d'une conductivité hydraulique par l'intermédiaire d'une infiltration *in situ* en régime non-saturé se fait à l'aide d'un infiltromètre à disque. Cet appareil a la particularité de pouvoir – au niveau du disque qui se trouve à sa base – infiltrer de l'eau à un potentiel légèrement négatif. En d'autres termes, cet appareil infiltre de l'eau avec une légère succion, et non pas sous charge (à un potentiel positif) comme d'autres méthodes d'infiltrométrie. Cette succion est obtenue à l'aide d'un dispositif de Mariotte, comme illustré sur la figure 25. Le fonctionnement de l'infiltromètre est

expliqué dans Coquet et al. (2000).

Quand l'appareil est maintenu en l'air, l'eau ne s'écoule pas, du fait de la succion imposée par l'appareil. Par contre, une fois posé sur une surface de sol plane, l'eau peut s'écouler. En effet l'eau va s'écouler du potentiel le plus élevé (potentiel de l'infiltromètre) au potentiel le plus bas (potentiel du sol), à moins que le sol ne soit à une teneur en eau proche de la saturation, et donc à un potentiel supérieur (moins négatif) ou égal à celui imposé par l'infiltromètre.

La gamme de potentiel pouvant être imposée est en général de h = -20 cm à h = 0 cm.



figure 25 – Schéma de l'infiltromètre à disque et des composantes de l'infiltration.

Avec Z0 le niveau de hauteur zéro correspondant à la **surface du sol**; h1 la différence entre le niveau d'eau dans le réservoir de Mariotte et le niveau bas du tube y plongeant; h2 la différence entre la surface du sol/de la membrane et le tube de bullage situé sous le réservoir; G est la zone du sol où les flux dont dominés par les **effets gravitaires**; CV est la zone du sol où les flux dont dominés par les effets de la <u>capillarité verticale</u>; CL est la zone du sol où les flux dont dominés par les effets de la <u>capillarité latérale</u>.

La surface du sol sur laquelle est posée l'infiltromètre est préparée préalablement à la pose de l'infiltromètre : elle doit être, autant que possible, horizontale et plane. Lors de la préparation, qui se fait généralement à l'aide d'un couteau, il faut éviter de créer un lissage de la surface, c'est-à-dire un étalement des particules qui bouchent la porosité naturelle du sol. Pour ce faire, on cherche à 'arracher' les petites aspérités plutôt qu'à les trancher, ce qui crée de fait une microrugosité.

Dans la pratique, le contact entre le sol et la membrane de nylon sous l'infiltromètre est souvent loin d'être parfait. On dépose donc une couche de sable fin de quelques millimètres à la surface du sol pour améliorer le contact. Cette couche de sable a une conductivité supposée beaucoup plus élevée que le sol sous-jacent. Elle a donc une influence prépondérante dans les premières secondes de l'infiltration puis, une fois que sa porosité active est saturée, son influence diminue au profit de celle du sol. Cette couche de sable (i) doit être la plus fine possible, (ii) ne doit pas dépasser latéralement

du disque d'infiltration, pour ne pas biaiser la surface d'infiltration réelle, (iii) doit être réalisée avec un sable dont les particules sont relativement calibrées (gamme de taille peu variable), et toujours identique d'une infiltration à l'autre. En pratique, le sable utilisé est un **sable de Fontainebleau** prélevé en milieu naturel.

Une mesure d'infiltrométrie se déroule comme suit :

- Les tubes de l'infiltromètre sont remplis d'eau jusqu'à ce qu'un faible volume d'air reste dans les tubes. Le tube plongeant depuis l'extérieur dans le vase de Mariotte est baissé au maximum ;
- L'infiltromètre est maintenu en l'air, et le tube plongeant dans le vase de Mariotte est remonté très progressivement. En dessus d'une certaine hauteur d'immersion du tube, de l'eau s'écoule de l'infiltromètre. La hauteur du tube marquant l'arrêt de l'écoulement est 'ajustée' progressivement. La pression à la base de l'infiltromètre est alors la pression atmosphérique ;
- Le tube plongeant dans le réservoir de Mariotte est descendu de 1 cm précisément.
 La pression de l'eau à la base de l'infiltromètre est alors de -1cm ;
- Une lecture de la hauteur d'eau dans l'infiltromètre est réalisée. Elle correspond à la hauteur au temps initial (t₀).
- L'infiltromètre est posé précisément sur la mince couche de sable de même diamètre que le disque préalablement placée sur la surface du sol ; très rapidement l'infiltromètre est stabilisé à l'aide de ses 3 pieds coulissants, sans perte de contact²⁴.
- Le chronomètre est déclenché au moment où l'infiltromètre est posé sur le sol.
- Une mesure de hauteur d'eau dans l'infiltromètre est prise à des intervalles réguliers, puis de plus en plus espacés (10 s, 20 s, 30 s, 40 s, 50 s, 1'00, 1'15, 1'30, 1'45, 2'00, 2'30, 3'00, 3'30 [...], 5', 6', 7'...). Il est important d'avoir de nombreuses mesures au début de l'infiltration pour une bonne estimation de la sorptivité.
- À la fin de l'infiltration, un prélèvement de sol est réalisé avec une gouge selon les modalités décrites dans le paragraphe suivant.

Les hauteurs d'eau infiltrées en fonction du temps sont reportées sur une fiche dédiée comportant toutes les informations nécessaires (identification du site, de la couche, de la répétition, de l'infiltromètre : diamètres du disque et du réservoir, des échantillons de sol...).

Avant de réaliser les calculs de sorptivité et de conductivité, il est nécessaire de convertir les mesures de manière à passer d'une 'hauteur d'eau infiltrée dans le réservoir [cm] = f(temps [min:sec])' à 'hauteur d'eau infiltrée sous le disque [mm] = f(temps [sec])'.

Une à deux répétitions des mesures d'infiltration sont réalisées pour chaque couche de sol à caractériser (selon le temps disponible), à une distance de 50 à 100 cm l'une de l'autre. Un peu moins d'un cinquième des couches (16) n'ont pas pu faire l'objet de deux répétitions successives (une seule), les 34 autres couches ont pu faire l'objet de deux répétitions, soit 84 infiltrations au total.

²⁴ En pratique, pour les infiltrations monopotentiel, l'infiltromètre est réglé à une succion de -15 à -20 cm, posé sur le sable, stabilisé rapidement, et réglé à nouveau à -1 cm. Au moment où l'infiltromètre est réglé à -1 cm le chronomètre est déclenché et la mesure commence. Il s'agit là d'un <u>mauvais</u> compromis entre l'obligation de stabiliser l'infiltromètre (ce qui prend au moins 30 secondes) et la nécessité de disposer de nombreuses mesures au tout début de l'infiltration (0 à 60 secondes).

Les disques utilisés ont un diamètre de 8 ou 8,5 cm. Leur taille précise, ainsi que les diamètres internes des réservoirs ont été mesurés à l'aide d'un pied à coulisse.

Détermination de la teneur en eau volumique initiale et finale

Certaines des méthodes d'estimation de la conductivité hydraulique au voisinage de la saturation exposée ci-dessous requièrent une mesure de la teneur en eau <u>volumique</u> avant et après l'infiltration.

Il n'est pas possible de connaître (de manière simple) la teneur en eau volumique avant infiltration sans perturber le sol destiné à recevoir le flux d'eau. La teneur en eau volumique moyenne des prélèvements de masse volumique apparente est donc utilisée pour estimer la teneur en eau <u>avant</u> infiltration.

Lorsque l'infiltration est terminée, l'infiltromètre est retiré de la zone infiltrée et la mince couche de sable déposée entre le sol et le disque d'infiltration est délicatement écartée à l'aire d'un grand couteau.

Un cylindre de sol non perturbé (théoriquement) est prélevé au centre du disque d'infiltration, sur une profondeur de 1 ou 2 cm à l'aide d'une gouge en acier de 2,5 cm de diamètre intérieur. Cette gouge est un tube biseauté à son extrémité, et gradué tous les centimètres en partant de son extrémité biseautée, ce qui permet de contrôler la profondeur et l'horizontalité du prélèvement.

Une fois la gouge enfoncée, le sol situé quelques centimètres alentour est excavé, jusqu'au niveau inférieur de la gouge. La lame de couteau est alors insérée horizontalement sous la gouge, en tranchant le sol, de manière à pouvoir l'extraire sans que du sol ne s'en échappe.

Ce sol est placé dans un flacon fermé hermétiquement, de masse connue et numéroté. De retour du terrain, le flacon et le sol sont pesés puis placés 48 h dans une étuve à 105°C. Le sol et le flacon sont ensuite pesés sur une balance de précision (précision 0,1 g, PB 3002-S, Mettler-Toledo). La masse tarée finale du poids du flacon est la masse de la phase solide. La première pesée permet de déduire la masse d'eau, et donc la teneur en eau massique ou volumique (connaissant la hauteur/le volume prélevé), ainsi que la masse volumique du sol prélevé.

La comparaison des masses volumiques mesurées à la gouge et des masses volumiques mesurées au cylindre (à côté) montre une **tendance très nette à la surestimation des masses volumiques apparentes par la méthode à la gouge**. Les teneurs en eau volumiques post-infiltration risquent donc d'être sous-estimées. Pour cette raison, un correctif a été apporté à la mesure. Le prélèvement à la gouge sert à estimer la teneur en eau massique, et la teneur en eau volumique est ré-estimée en utilisant la masse volumique apparente mesurée avec la méthode au cylindre. L'équation 6 (p. 41) donne le calcul de la teneur en eau volumique finale θ (post-infiltration) en utilisant ici la masse volumique apparente ρ_{app} mesurée au cylindre et la teneur en eau <u>massique</u> w mesurée sur le prélèvement à la gouge.

□ Processus intervenant lors d'une mesure d'infiltration

Les méthodes d'interprétation des mesures d'infiltration axisymétrique monopotentiel et mono-rayon reposent sur l'analyse de **différents processus qui interviennent lors de l'établissement progressif d'un régime/flux permanent**. Il peut être utile d'en donner une description succincte avant de présenter les formalismes mathématiques permettant de les caractériser. Ces processus sont :

- L'absorption capillaire <u>verticale</u> (au droit du disque de l'infiltromètre) de l'eau par le sol. Elle est due à la différence de potentiel entre le sol et la base de l'infiltromètre. Ce processus, peut être considéré comme monodimensionnel (figure 25, p. 101, zone 'CV' du bulbe d'infiltration).
- L'infiltration d'eau sous l'effet de la <u>gravité</u>. Ce processus peut être considéré comme monodimensionnel (figure 25, zone 'G' du bulbe d'infiltration).
- L'infiltration de l'eau sous l'effet de l'absorption capillaire <u>latérale</u>, à la périphérie du bulbe d'infiltration qui se développe sous l'infiltromètre. Ce processus est tridimensionnel et axisymétrique (il se déroule de manière symétrique autour de l'axe vertical de l'infiltration ; figure 25, zone 'CL' du bulbe d'infiltration).

Ces processus ont une **importance relative qui varie au cours de l'infiltration**, que l'on peut diviser schématiquement en **3 phases** successives :

- Phase 1 : Dans un premier temps la capillarité verticale domine l'infiltration. Le sol sous l'infiltromètre n'a alors pas encore atteint la teneur en eau qui correspond au potentiel imposé par l'appareil. Cette phase est relativement courte par rapport aux phases suivantes (comportement à l'origine de l'infiltration).
- Phase 2: Dans un second temps les processus gravitaire et de capillarité latérale dominent conjointement l'infiltration, tandis que l'importance de la capillarité verticale, toujours existante, décroît rapidement. Lors de cette 2^e phase, suivant l'importance relative du processus gravitaire et du processus capillaire latéral, le processus gravitaire pourra atteindre son maximum avant ou après le processus capillaire latéral. On parle alors de domaine gravitaire ou de domaine capillaire, pour caractériser les sols mesurés.
- Phase 3 : Enfin, la troisième phase de l'infiltration voit le processus de capillarité verticale devenir négligeable, tandis que l'effet de la capillarité latérale devient constant par rapport au temps ('ordonnée à l'origine' de l'infiltration cumulée). Le processus gravitaire domine l'infiltration.

Ces trois phases décrivent (segmentent) des **évolutions en réalité continues** des processus lors de l'infiltration.

Les différentes méthodes d'analyse des résultats des mesures d'infiltration peuvent être classées selon plusieurs critères :

 La dimension des processus pris en compte : monodimensionnels (1D) ou tridimensionnels (3D).

Il faut noter que les méthodes monodimensionnelles négligent de fait la capillarité latérale.

L'intervalle de temps, auquel correspond un 'régime' d'infiltration, pour lequel la méthode est valide : (a) l'effet initial de la sorptivité verticale, sur un intervalle de temps court ; (b) le régime transitoire, quand les effets de la sorptivité verticale, latérale et de la gravité influencent simultanément l'infiltration ; (c) le régime (quasi)-permanent, quand l'effet de la capillarité verticale devient négligeable devant la capillarité latérale et la gravité.

□ La solution analytique de Wooding (1968), base théorique de l'infiltrométrie

En 1968, Wooding a proposé une solution approchée du flux en régime permanent de l'infiltration non-saturée.

J. Moeys | Partie III

$$q_{\infty}(h_{fin}) = K(h_{fin}) + \frac{4 \cdot \Phi_{(h_{ini}, h_{fin})}}{\pi \cdot r}$$

équation 32 – Solution approchée de Wooding 1968 du flux en régime permanent pour une infiltration axisymétrique.

Avec h_{fin} [L] ou (m) le potentiel matriciel du sol une fois le régime permanent atteint, qui est aussi le potentiel imposé par l'infiltromètre à la surface du sol ; h_{ini} [L] le potentiel du sol initial, avant l'infiltration ; q_{∞} [L.T⁻¹] ou (m.s⁻¹) la densité de flux de l'infiltration en régime permanent à l'interface entre le sol et l'infiltromètre ; K [L.T⁻¹] la conductivité hydraulique du sol (au potentiel h_{fin}) ; Φ [L².T⁻¹] ou (m².s⁻¹) le potentiel d'écoulement entre le potentiel h_{ini} et le potentiel h_{fin} , défini par Gardner en 1958 (équation 33) ; r [L] ou (m) est le rayon du disque utilisé lors de l'infiltration.

Cette équation de transfert est une des solutions à la loi de Darcy généralisée, appliquée au cas de l'infiltration axisymétrique. Elle sert de base à différentes méthodes de mesure de la conductivité hydraulique non saturée par infiltrométrie. Le potentiel d'écoulement avait été auparavant défini par Gardner (1958) comme l'intégrale la conductivité hydraulique par rapport au potentiel matriciel, entre le potentiel initial et le potentiel final. Il reflète le rôle de la capillarité dans le processus d'infiltration.

$$\Phi_{(h_{ini},h_{fin})} = \int_{h_{ini}}^{h_{fin}} K(h) . dh$$

équation 33 – Potentiel d'écoulement Φ défini par Gardner (1958).

Ce jeu d'équation repose sur deux **hypothèses de base très importantes** (d'après Vandervaere, 1995) :

- (1) Le sol est un milieu aux propriétés homogènes, il est isotrope (ces propriétés ne varient pas selon la direction), et sa profondeur est 'infinie'.
- (2) Le potentiel matriciel du sol (h) est uniforme au temps initial (t₀) de l'infiltration et la conductivité hydraulique du sol à t₀ est très faible (donc négligeable) par rapport à la conductivité hydraulique du sol au potentiel final (quand l'infiltration atteint le régime quasi permanent).

Si **la condition n² peut être respectée** (quand la saison s'y prête) en effectuant les mesures sur un sol relativement sec, à un potentiel imposé (par l'infiltromètre) relativement proche de h = 0 m, la **condition n⁴** est de toute évidence **fausse dans l'horizon de surface**. Ce dernier est en effet **hétérogène** (*cf. « le profil cultural », p. 36*), **non infini** (puisque limité à 15 ou 30 cm), et **parfois anisotrope** (e.g. Banton, 1993), notamment s'il est bien structuré.

En se basant sur l'équation liant K à h établie par Gardner en 1958 et sur l'équation de Wooding (1958) (équation 32) il est possible d'utiliser des infiltrations successives réalisées sur un même point de mesure et à un même potentiel, mais avec deux tailles de disque différentes, pour évaluer la valeur de K (méthodes dites multi-rayons, définies par Smetten et Clothier, 1989 et initiées par Scotter, 1982).

Il est aussi possible d'utiliser des infiltrations successives à des potentiels croissants pour estimer la valeur de K (méthodes dites multi-potentiels, initiées simultanément par Reynolds et Elrick, 1990 et par Ankeny *et al.*, 1991).

C'est une troisième approche, initiée par White et Sully (1987) et développée par la suite, qui a été utilisée lors de cette étude. Cette approche fait intervenir la sorptivité du sol pour estimer sa conductivité. Elle repose sur des mesures d'infiltration à un seul potentiel et un rayon de disque unique.

□ Calcul de S et K par la méthode de White et Sully (1987)

Relation entre Φ et S établie par White et Sully (1987)

White et Sully ont établi en 1987 une relation entre la sorptivité du sol et le potentiel d'écoulement :

$$\Phi_{(h_{ini}, h_{fin})} = \Phi_{(\theta_{ini}, \theta_{fin})} = \frac{b \cdot S^{2}_{(\theta_{ini}, \theta_{fin})}}{\theta_{fin} - \theta_{ini}}$$

équation 34 – Relation entre la sorptivité et le potentiel d'écoulement établie par White et Sully (1987).

Avec θ_{ini} [L³.L⁻³] ou (m³.m⁻³) et h_{ini} [L] ou (m) les teneur en eau et potentiel initiaux du sol ; θ_{fin} et h_{fin} les teneur en eau et potentiel quand l'infiltration atteint un régime permanent ; Φ [L².T⁻¹] ou (m².s⁻¹) le potentiel d'écoulement entre le potentiel h_{ini} et le potentiel h_{fin} ; b [-] un paramètre dépendant de la 'diffusivité capillaire', qui définit les relations entre K(h) et $\theta(h)$; S_(θ ini, θ fin) [L.T^{-1/2}] ou (m.s^{-1/2}) est la sorptivité capillaire du sol entre θ_{ini} et θ_{fin} .

Les valeurs possibles du paramètre 'b' (différent du paramètre b de Campbell), qui ne peut être mesuré lors d'une infiltration, vont de 1/2 à $\pi/4$. Warrick et Broadbridge (1992) proposent une valeur de b = 0.55 que nous utiliserons par la suite. En remplaçant Φ dans l'équation 32 par sa valeur donnée par l'équation 34, on obtient une estimation de $q_{\infty}(h_{fin})$ qui dépend de $K(h_{fin})$ et de S.

$$q_{\infty}(h_{fin}) = K(h_{fin}) + \frac{4 \cdot b \cdot S^{2}_{(\theta_{ini}, \theta_{fin})}}{\pi \cdot r \cdot (\theta_{fin} - \theta_{ini})}$$

équation 35 – Équation de Wooding reformulée en fonction de la sorptivité d'après la relation entre sorptivité et potentiel d'écoulement de White et Sully 1987.

Lors d'une infiltration non-saturée, il est facile d'estimer le flux en régime saturé $q_{\omega}(h_{\rm fin})$ sur une courbe d'infiltration cumulée en fonction du temps (pente de la courbe), il ne manque alors qu'une estimation de la sorptivité pour calculer la valeur de $K(h_{\rm fin})$.

Estimation de la sorptivité par Philip (1969)

Philip, 1969 avait proposé une estimation de la sorptivité du sol à partir d'une mesure d'infiltration monodimensionnelle :

$$I(t) = S_{(\theta_{ini}, \theta_{fin})} \cdot \sqrt{t} + A \cdot t$$

équation 36 – Estimation de la sorptivité de Philip (1969) sur les temps courts de la mesure d'infiltration.

Avec I [L] ou (m) l'infiltration cumulée (lame d'eau infiltrée dans le sol) en fonction du temps t ; $S_{(0ini, \theta fin)}$ [L.T^{-1/2}] ou (m.s^{-1/2}) est la sorptivité capillaire du sol entre θ_{ini} et θ_{fin} ; A un paramètre liée à la conductivité hydraulique finale, entre 1/3 et 2/3 de K(h_{fin}) (Talsma et Parlange, 1972, cité par Roulier, 1999).

Dans cette équation, le premier terme (S.t^{1/2}) reflète les effets de la **capillarité verticale** (qui devient négligeable quand l'infiltration atteint un régime permanent, d'où le domaine de validité restreint de l'équation), tandis que le deuxième terme A.t reflète les **effets gravitaires**. Cette équation est **monodimensionnelle**, car elle néglige les effets de la capillarité latérale.

Le comportement à l'origine de la courbe d'infiltration reflète quant à lui les seuls effets de la sorptivité, les effets gravitaires étant théoriquement négligeables. On reformule alors l'équation de Philip comme suit :

$$I(t) \simeq S_{(\theta_{ini}, \theta_{fin})} \cdot \sqrt{t}$$

équation 37 – Estimation de la sorptivité de Philip (1969) à partir du le comportement initial de la mesure d'infiltration.

– Calcul des paramètres

Les mesures d'infiltration non-saturée permettent d'obtenir une série temporelle de mesures de hauteur d'eau infiltrée sous le disque en fonction de la durée de l'infiltration. Les étapes du calcul de la conductivité hydraulique non-saturée au potentiel de l'infiltration sont illustrées ci-dessous par des figures sur un exemple théorique d'infiltration.

Les étapes du calcul de S, q et K sont :

- Sur un graphique I=f(\sqrt{t}), il faut déterminer visuellement la partie de l'infiltration appartenant au 'temps court' caractérisant l'effet de la sorptivité (= partie initiale de la courbe dont la pente est plus faible que le reste de la courbe), que nous appelons phase 1. Le reste de la courbe est la phase 2.
- Sur le graphique I=f(\sqrt{t}), une régression est calculée sur la phase 1. La valeur de la sorptivité est égale à la pente de la régression (figure 26).



figure 26 – Méthode de détermination graphique de la sorptivité (White et Sully, 1987).

Les 2 segments à angles droits marquent les limites de la phase 1. NB : le choix du partitionnement entre régime transitoire (phase 1) et régime permanent ne repose pas sur d'autres critères que l'apparente linéarité de la phase 1 (choix utilisateur).

Sur cet exemple, la valeur de la sorptivité est égale à 15,9 mm.h^{-1/2}. Les valeurs de
J. Moeys | Partie III

hauteur d'eau infiltrée ont été calculées à partir du formalisme de Haverkamp *et al.* (1994), modifié par Roulier (1999) pour tenir compte de l'effet du sable (temps d'action et lame d'eau infiltrée dans le sable). Il n'est pas détaillé ici, car il n'a pas été utilisé en dehors de ces exemples.

Sur le graphique Infiltration cumulée=f(temps), une régression est calculée sur la phase 2. La valeur du flux en régime permanent est égale à la pente de la régression (figure 27).



figure 27 – Méthode de détermination graphique du flux en régime permanent q_{RP} (White et Sully, 1987).

Les 2 segments à angles droits marquent les limites de la phase 2.

Sur cet exemple, le flux q_{RP} est égal à 25 mm.h⁻¹. Avec la sorptivité calculée précédemment, on alors peut calculer la conductivité hydraulique, égale à 10,5 mm.h⁻¹.

Les valeurs de S et K utilisées pour générer cet exemple théorique sont en réalité de 8,7 mm.h^{-1/2} et 26 mm.h⁻¹ (avec un temps d'effet du sable de 15 s et une hauteur d'eau infiltrée dans le sable de 1 mm). La valeur de K estimée par la méthode de White et Sully (1987) sous-estime donc de 60 % la valeur réelle, tandis que la sorptivité est surestimée dans d'un facteur 1,5 (dans cet exemple).

La méthode de White et Sully (1987) comporte **deux biais importants** : (1) elle ne tient pas compte de la **capillarité latérale** et (2) elle ne prend pas en compte l'**effet du sable**. Il est possible de s'inspirer de la méthode de détermination graphique présentée au paragraphe suivant pour prendre en compte le point 2. Ces modifications de la méthode de White et Sully sont exposées plus loin, après la présentation de la méthode Haverkamp *et al.* (1994).

Il existe aussi un facteur d'incertitude lié à la subjectivité (choix de la personne qui réalise les calculs) de la partition entre les deux phases (séparation de l'infiltration entre régime transitoire et régime quasi-permanent). Il en résulte un 'facteur humain' non-négligeable lors de la détermination de la sorptivité et de la conductivité. Pour cette raison, les calculs réalisés sur les infiltrations ont tous été effectués avec un 'algorithme' de traitement automatisé. Cet algorithme est concrètement une suite d'opérations réalisées avec un langage de programmation statistique interprété, le langage R (se résumant à un fichier de commandes que nous appellerons 'Script'). Les caractéristiques de ce traitement sont exposées plus loin, dans un paragraphe spécifique.

La méthode de détermination graphique de Haverkamp *et al.* (1994), ainsi que les méthodes d'ajustement direct présentées dans les paragraphes suivants présentent la même source d'incertitude liée à la personne qui réalise les calculs. Elles ont aussi été traitées par un script en langage R.

□ Calcul de S et K par la méthode de Haverkamp et al. (1994)

En 1994, Haverkamp *et al.* ont proposé un jeu d'équations similaires ($I = f(t; \sqrt{t})$), mais avec une composante qui prend en compte les effets de la capillarité latérale.

 $- \acute{Equations de Haverkamp et al. (1994)}$ $I(t)_{3D,RT} = C1 \cdot \sqrt{t} + C2 \cdot t$ avec $C1 = S_{(\theta_{ini}, \theta_{ini})} \text{ et } C2 = \frac{2 - \beta}{3} \cdot K_{h_{fin}} + \frac{\gamma \cdot S^{2}_{(\theta_{ini}, \theta_{fin})}}{r \cdot (\theta_{fin} - \theta_{ini})}$ (1)
(2)
(3)

équation 38 – Équation de Haverkamp et al. 1994 de l'infiltration en régime transitoire.

Avec $I_{3D,RT}$ [L] ou (m) la hauteur d'eau infiltrée, fonction du temps t (s). L'indice 3D signifie que l'équation est tridimensionnelle axisymétrique (la capillarité latérale est prise en compte), et l'indice RT signifie Régime Transitoire ; θ_{ini} et θ_{fin} [M.L⁻³] ou (kg.m⁻³) les teneurs en eau initiale et finale du sol ; $S_{(0ini, \theta fin)}$ [L.T^{-1/2}] ou (m.s^{-1/2}) est la sorptivité capillaire du sol entre θ_{ini} et θ_{fin} ; β [-] est un paramètre dépendant du type de sol (diffusivité capillaire) et du potentiel d'infiltration, compris entre 0 et 1 (Roulier, 1999) ; γ [-] est une constante apparentée au paramètre b de l'équation 34 (Coquet *et al.*, 2000), et lié aux effets de la gravité dont la valeur est située entre 0,6 et 0,8 (Roulier, 1999) ; r [L] ou (m) est le rayon du disque utilisé pour la mesure d'infiltration.

La composante (1) est liée à la capillarité verticale comme dans l'équation de Philip (1969), la composante (2) à la gravité et la composante (3) à la capillarité latérale. Cette équation est cohérente avec celle de Philip (1969), quand le rayon r tend vers l'infini, c'est à dire dans un cas monodimensionnel (Roulier, 2000).

Le paramètre γ est lié au paramètre b de l'équation 34 par la relation $\gamma = (4.b)/\pi$. γ est donc égal à 0,7 si b est égal à 0,55. Smetten *et al.* (1994) proposent la valeur de 0,75 pour γ (cité par Vandervaere *et al.*, 2000*a*), valeur qui sera utilisée pour les calculs de ce travail. Cette relation permet de reformuler l'équation de C2 sous une forme proche de l'équation de Wooding exprimée en fonction de la sorptivité (équation 35) :

$$C2 = \frac{2-\beta}{3} \cdot K_{h_{fin}} + \frac{4 \cdot b \cdot S^{2}_{(\theta_{ini}, \theta_{fin})}}{\pi \cdot r \cdot (\theta_{fin} - \theta_{ini})}$$

équation 39 – Paramètre C2 de l'équation 38 reformulé avec le paramètre b.

_

Détermination graphique par Vandervaere (1995)

Cette équation doit être linéarisée de manière à permettre une estimation graphique

des paramètres C1 et C2 par une simple régression linéaire. Vandervaere (1995) propose une 'linéarisation différentielle' de l'équation en dérivant l'infiltration par la racine carrée du temps, en se basant sur la proposition de Smetten *et al.* (1995), ce qui donne :

$$\frac{\mathrm{d}I}{\mathrm{d}\sqrt{t}} = \mathrm{C}1 + 2.\mathrm{C}2.\sqrt{t}_{geom}$$

équation 40 – Linéarisation différentielle de l'équation de Haverkamp *et al.* (1994) par Vandervaere (1995), pour la détermination graphique des paramètres.

Avec C1 exprimé en $[L.T^{-1/2}]$ et C2 en $[L.T^{-1}]$; les paramètres sont identiques à ceux de l'équation 38. Le calcul de d.I/d. \sqrt{t} et celui de $\sqrt{t_{geom}}$ sont présentés ci-dessous.

Le calcul des ordonnées et des abscisses du graphique se base sur les variations d'infiltration cumulées et de temps sur l'intervalle [i,i+1]:

$$\frac{\mathrm{d}\,I}{\mathrm{d}\,\sqrt{t}} \simeq \frac{\Delta\,I}{\Delta\,\sqrt{t}} = \frac{I_{i+1} - I_i}{\sqrt{t_{i+1}} - \sqrt{t_i}} \qquad \text{et} \qquad \sqrt{t_{geom}} = \sqrt{\sqrt{t_{i+1} \cdot t_i}}$$

équation 41 – Calcul de d.I/d. \sqrt{t} et de $\sqrt{t_{geom}}$ sur l'intervalle [i-1;i].

Avec I_{i+1} et I_i , $\sqrt{t_{i+1}}$ et $\sqrt{t_i}$, l'infiltration cumulée [L] ou (m) à la (i+1)^e mesure et à la i^e mesure, le temps à la (i+1)^e mesure et à la i^e mesure respectivement. Il faut noter que les valeurs de \sqrt{t} du calcul de d.I/d. \sqrt{t} ne doivent <u>pas</u> être basées sur $\sqrt{t_{geom}}$.

... ou alternativement sur l'intervalle [i-1,i+1] :

$$\frac{\mathrm{d}I}{\mathrm{d}\sqrt{t}} \simeq \frac{\Delta I}{\Delta\sqrt{t}} = \frac{I_{i+1} - I_{i-1}}{\sqrt{t_{i+1}} - \sqrt{t_{i-1}}} \qquad \text{et} \qquad \sqrt{t_{geom}} = \sqrt{\sqrt{t_{i+1} \cdot t_{i-1}}}$$

équation 42 – Calcul de d.I/d. \sqrt{t} et de $\sqrt{t_{geom}}$ sur l'intervalle [i-1,i+1].

Les graphiques d.I/d. \sqrt{t} exprimé en fonction de $\sqrt{t_{geom}}$. Il faut noter que les valeurs de \sqrt{t} du calcul de d.I/d. \sqrt{t} ne doivent <u>pas</u> être basées sur $\sqrt{t_{geom}}$.

La détermination graphique de C1 et C2 suit les étapes suivantes :

- Sur un graphique $\Delta I / \Delta \sqrt{t} = f(\sqrt{t_{geom}})$, le temps d'effet du sable est déterminé : il va de $[t_{\{i=1\}} a t_{\{\Delta I / \Delta \sqrt{t}=min(\Delta I / \Delta \sqrt{t})}]$, min $(\Delta I / \Delta \sqrt{t})$ étant la valeur minimum de $\Delta I / \Delta \sqrt{t}$.
- Sur ce même graphique, après élimination des mesures appartenant au temps d'effet du sable déterminées ci-dessus, on <u>détermine visuellement</u> la durée de la phase transitoire de l'infiltration. Pendant la phase transitoire, ∆I/∆√t doit évoluer de manière relativement linéaire avec √t_{geom}.
- On calcule une régression linéaire sur les valeurs de cette phase transitoire : le paramètre C1 est l'ordonnée à l'origine, le paramètre C2 est la pente de cette régression, ce qui permet d'évaluer S et K.

La figure 28 illustre la méthode de détermination de Vandervaere (1995) (sur le même jeu de données théorique que celui exposé avec la méthode de White et Sully, 1987, et sur l'intervalle [i,i+1]).

Sur cet exemple, la sorptivité (égale à C1, l'ordonnée à l'origine) est égale à $10 \text{ mm.h}^{-1/2}$. La valeur de C2 (égale à la pente de la régression divisée par 2) est de 14.8 mm.h^{-1} . Connaissant C1 et C2, on peut calculer K qui vaut ici **19,3 mm.h**⁻¹. Cette valeur est beaucoup plus proche de la valeur réelle de K utilisée pour générer les données de l'exemple (erreur de 30 %).

Il faut signaler que des erreurs de mesure (décalage dans la lecture de la hauteur

J. Moeys Partie III

d'eau infiltrée ou décalage dans la lecture du temps de mesure ; effet du vent sur les tubes de mise à l'air de l'infiltromètre), qui n'apparaissent pas comme importantes sur un graphique I=f(t), sont en revanche considérablement amplifiées sur un graphique d.I/d. $\sqrt{t}=f(\sqrt{t_{geom}})$. Cela peut nuire à la qualité des estimations de S et K par la régression linéaire, et cela renforce du même coup les effets 'opérateurs' lors du calcul (estimation de la limite entre les phases d'infiltration).



figure 28 – Méthode de détermination de la sorptivité sur un graphique $d.I/d.\sqrt{t} = f(\sqrt{t})$, avec la méthode de Haverkamp *et al.* (1994).

Modifications du calcul de S par la méthode de White et Sully (1987)

Quelques changements ont été apportés à la méthode de détermination de la sorptivité de White et Sully pour tenir compte de l'effet du sable.

- Le tout début de la courbe d'infiltration est en réalité influencé fortement par la couche de sable déposée entre le sol et l'infiltromètre. Pour réduire son influence sur les calculs, l'estimation de la sorptivité a été effectuée en tenant compte des propositions de Haverkamp *et al.* (1994) :
 - Détermination du <u>temps</u> d'effet du sable avec la méthode proposée par Vandervaere (1995) exposée au chapitre précédent, puis 'élimination' des mesures appartenant au temps d'effet du sable.
 - Sur ce même graphique, la valeur ∆I/∆√t de <u>la première mesure 'sans effet du</u> <u>sable' est alors considérée comme égale à la sorptivité</u> (et non l'ordonnée à l'origine de la droite de régression ∆I/∆√t=f(√t) comme pour la méthode Haverkamp *et al.*,1994). La figure 29 ci-dessous illustre la détermination de S. La méthode repose cependant aussi sur une hypothèse forte, et surestime la sorptivité réelle.



figure 29 – Méthode de détermination de la sorptivité sur un graphique d.I/d. $\sqrt{t} = f(\sqrt{t})$, pour la méthode White et Sully modifiée.

Sur d.I/d. $\sqrt{t} = f(\sqrt{t})$, en régime transitoire, l'équation 37 devient d.I/d. $\sqrt{t}=S$. On considère que le premier point du régime transitoire reflète le comportement à l'origine de l'infiltration.

Avec l'exemple ci-dessus, on évalue S à 14,4 mm.h^{-1/2}. q_{RP} avait été déterminé précédemment (25 mm.h⁻¹), ce qui permet de calculer la valeur de K (13,2 mm.h⁻¹). L'écart par rapport à la valeur réelle de 26 mm.h⁻¹ est moindre qu'avec le calcul de sorptivité sur I=f(\sqrt{t}), mais toujours conséquent, avec 50 % d'erreur (pour cet exemple).

Coquet *et al.* (2000) montrent que la méthode de White et Sully (1987) tend à surestimer systématiquement la valeur de S, et donc à sous estimer la valeur de K.

Si cette méthode de calcul de la sorptivité avec les équations de White et Sully (1987) semble plus fiable, le résultat est néanmoins **dépendant** du choix de calculer les valeurs de ΔI et de ΔT sur [i,i+1] ou [i-1,i+1] : Le choix d'un calcul sur [i,i+1] ou sur [i-1,i+1] peut en effet modifier un peu le temps d'action du sable estimé.

On constate en pratique que certaines <u>imprécisions</u> sur les mesures peuvent induire des valeurs très faibles des valeurs de d.I/d. \sqrt{t} calculées avec ces mesures imprécises. Si l'imprécision a lieu sur la i^e mesure, les valeurs de (d.I/d. \sqrt{t}) aux points i-1 et i sont affectées (pour un calcul sur [i,i+1]), ou les valeurs (d.I/d. \sqrt{t}) aux points i-1 et i+1 (pour un calcul sur [i-1,i+1]). On peut repérer ces artéfacts au fait que, contrairement aux hypothèses de Haverkamp *et al.* (1994) – sur les mesures précédant le minimum de d.I/d. \sqrt{t} , considérées comme influencées par le sable de contact – d.I/d. \sqrt{t} n'est <u>pas décroissante</u> en fonction de $\sqrt{t}_{géom}$.

Pour remédier à ce problème, l'algorithme procède comme suit :

– (a) Repérage du minimum sur d.I/d. \sqrt{t} . Nous appellerons la mesure correspondante la mesure n°'s';

- (b) Si le nombre de mesures sur l'intervalle [1,'s'] est inférieur ou égal à 4, la mesure n°'s' est considérée comme la dernière influencée significativement par le sable de contact ;
- (c) Dans le cas contraire, un calcul de la pente de la régression d.I/d. $\sqrt{t} = f(\sqrt{t_{géom}})$, est réalisé sur l'intervalle [1,'s'] :
 - (d) Si la pente est négative ou nulle, les conditions de Haverkamp *et al.* (1994) sont respectées et la mesure n°'s' est considérée comme la dernière influencée significativement par le sable de contact ;
 - (e) Si la pente est positive, les conditions de Haverkamp *et al.* (1994) ne sont pas respectées : l'opération est relancée sur l'intervalle [1, 's'-1] (puis [1, 's'-2], puis [1, 's'-3]...), à partir de l'étape (a), et jusqu'à ce que la pente de la régression soit négative OU jusqu'à ce que le nombre de mesure sur [1, 's'] soit inférieur ou égal à 4.

Enfin, pour prévenir toute défaillance de cet algorithme, l'opérateur à la possibilité de choisir lui-même (de 'forcer') le temps d'action du sable via une valeur qu'il saisit dans une table dédiée de la base de données des mesures. Cela ne concerne que 8 infiltrations sur les 130 étudiées.

□ Temps caractéristiques de l'infiltration

Différents 'temps d'action' ont été définis pour déterminer les intervalles de temps sur lesquels prédominent les 3 processus gouvernant l'infiltration (capillarité verticale, capillarité latérale, gravité).

- *Le temps gravitaire de Philip (1969)*

Philip (1969 ; cité par Smetten *et al.*, 1995) a défini le **temps gravitaire** comme étant le temps au bout duquel les effets gravitaires prennent le dessus sur les effets de la capillarité verticale :

$$T_{GRAV} = \left(\frac{S_{(\theta_{ini}, \theta_{fin})}}{K_{h_{fin}}}\right)^2$$

équation 43 – Temps gravitaire de Philip (1969).

Avec T_{GRAV} [T] ou (s) le temps gravitaire ; $S_{(\theta ini, \theta fin)}$ [L.T^{-1/2}] ou (m.s^{-1/2}) est la sorptivité capillaire du sol entre θ_{ini} et θ_{fin} , les teneurs en eau volumiques initiale et finale du sol ; $K_{h.fin}$ [L.T⁻¹] ou (m.s⁻¹) la conductivité hydraulique au potentiel imposé par l'infiltromètre.

Le temps géométrique (Philip, 1969 ; Roulier, 1999)

Philip (1969) a aussi défini le **temps géométrique** comme étant le temps au bout duquel les effets de la capillarité latérale prennent le dessus sur ceux de la capillarité verticale. Roulier (1999) a introduit une modification du calcul de ce temps géométrique, qui est utilisée pour ce travail :

J. Moeys | Partie III

$$T_{GEOM} = \left(\frac{r \cdot (\theta_{fin} - \theta_{ini})}{\gamma \cdot S_{(\theta_{ini}, \theta_{fin})}}\right)^2$$

équation 44 – Temps géométrique de Philip 1969 modifié par Roulier 1999.

Avec T_{GEOM} [T] ou (s) le temps géométrique ; r [L] ou (m) le rayon du disque d'infiltration ; γ [-] est la constante introduite dans l'équation 38. L'équation originale de Philip (1969) ne comprend pas le terme γ .

Le temps de stabilisation de Vandervaere et al. (2000b)

$$T_{STAB} = \left(\frac{S_{(\theta_{ini}, \theta_{fin})}}{\frac{2-\beta}{3} \cdot K_{h_{fin}} + \frac{\gamma \cdot S^{2}_{(\theta_{ini}, \theta_{fin})}}{r \cdot (\theta_{fin} - \theta_{ini})}}\right)^{2}$$

équation 45 – Temps de stabilisation de Vandervaere 2000.

Avec T_{STAB} [T] ou (s) le temps de stabilisation ; β [-] le paramètre introduit dans l'équation 38 ; La version initiale de l'équation du temps de stabilisation de Vandervaere (1995, p. 215) ne comprend pas le terme (2- β)/3.

Vandervaere *et al.* (2000b) (version modifiée par rapport à Vandervaere, 1995) ont défini un autre temps caractéristique, nommé temps de stabilisation, comme étant le temps au bout duquel les effets de la capillarité verticale sont dominés par les effets combinés de la capillarité latérale et de la gravité (voir ci-dessus).

Ce temps de stabilisation peut potentiellement remplacer le temps gravitaire et le temps géométrique pour définir le temps au bout duquel le régime (quasi) permanent est établi. Sa valeur est comprise entre T_{GRAV} et T_{GEOM} . Si les effets gravitaires dominent les effets de la capillarité latérale, le temps de stabilisation se rapproche de T_{GRAV} . Dans le cas inverse, le temps de stabilisation se rapproche de T_{GEOM} . Si la conductivité hydraulique K est très faible au regard de S, le temps de stabilisation peut être inférieur au temps gravitaire.

Modalité d'utilisation des temps caractéristiques

Les temps caractéristiques exposés ci-dessus permettent de déterminer *a priori* l'intervalle de temps le plus favorable pour effectuer les calculs en régime transitoire pour un sol dont les paramètres (S et K) sont connus.

Or ces paramètres ne sont pas connus la plupart du temps, puisqu'on cherche à les déterminer. Les temps caractéristiques sont donc utilisés *a posteriori* pour s'assurer que l'intervalle de temps sur lequel on a effectué les calculs est bien cohérent avec les temps caractéristiques estimés avec les valeurs de S et K calculées (c'est-à-dire est inférieur ou égal).

Cette utilisation *a posteriori* des temps caractéristiques les rend, comme pour S et K, sensibles aux imprécisions de la mesure ou au non-respect des conditions optimales d'application des méthodes exposées ci-dessus.

En pratique, l'intervalle de temps sur lequel ont été effectués les calculs a été considéré comme valide s'il est inférieur ou égal au temps de stabilisation, ou s'il est inférieur ou égal au temps gravitaire.

Si plusieurs intervalles de temps sont possibles pour effectuer le calcul de S et de K

(i.e. plusieurs intervalles de temps sont inférieurs ou égaux à T_{GRAV} ou T_{STAB}), **c'est l'intervalle de temps le plus grand qui a été choisi systématiquement**. Le nombre d'intervalles de temps différents qu'il est possible d'utiliser étant généralement important, il a été décidé d'automatiser ce choix à l'aide d'un script R décrit plus loin.

□ Équation de Haverkamp et al. (1994) pour le régime permanent

Haverkamp *et al.* (1994) ont aussi défini une équation de l'infiltration sous le disque pour le régime (quasi-)permanent. Il est donc possible de calculer S et K à partir du régime permanent, ou de vérifier la cohérence des valeurs de S et K calculée sur le régime transitoire appliquées au régime permanent.

$$\begin{split} I(t)_{3\mathrm{D},RP} = & A_{RP} \cdot t + B_{RP} \\ \text{avec} \qquad & A_{RP} = K_{h_{fin}} + \frac{\gamma \cdot S^2_{(\theta_{fin},\theta_{ini})}}{r \cdot (\theta_{fin} - \theta_{ini})} \text{ et } \qquad & B_{RP} = \frac{S^2_{(\theta_{fin},\theta_{ini})}}{2 \cdot K_{h_{fin}} \cdot (1 - \beta)} \cdot \ln\left(\frac{1}{\beta}\right) \end{split}$$

équation 46 – Équation de Haverkamp *et al.* (1994) de l'infiltration en régime quasipermanent.

Les variables sont les mêmes que pour l'équation du régime transitoire (équation 38).

□ Calcul de S et K par ajustement direct sur le régime transitoire et/ou le régime permanent

- *Pertinence de l'ajustement direct – solutions*

Les méthodes de calcul de White et Sully (1987) et de Haverkamp *et al.* (1994) ont l'avantage d'être basées sur des régressions linéaires, ce qui assure à la fois une facilité de mise en œuvre (avec les logiciels statistiques usuels), une reproductibilité du résultat²⁵ et la possibilité de calculer des intervalles de confiance sur les paramètres calculés.

Il peut cependant être intéressant d'essayer de **réaliser un ajustement direct**, **non-linéaire**, **sur I=f(t) des paramètres S et K** de l'équation de Haverkamp *et al.* (1994) aux temps courts, ou aux temps longs, avec un outil dédié aux ajustements non-linéaires. Haverkamp (1995, p. 145) montre que – bien que cette approche ait déjà été utilisée à plusieurs reprises – la méthode tend à surestimer S, du fait des effets du sable qui ne sont pas pris en compte. L'auteur ne donc pas cette approche. Vandervaere *et al.* (2000a) montrent que l'ajustement non-linéaire de S et K peut aboutir à des valeurs aberrantes (très élevées) de S et/ou de C2 (et donc de K). La sorptivité S est en effet présente dans les deux termes de l'équation (C1 et C2), et élevée au carré dans le second terme, ce qui nuit à un ajustement correct de S et de K (les effets de ce dernier pouvant être compensés par S).

Cette approche a été testée malgré tout, pour des raisons qui seront développées dans les résultats.

Une telle procédure repose sur le calcul d'une 'fonction d'erreur', qui reflète l'écart entre les valeurs prédites par l'équation et les valeurs réelles (mesurées),

²⁵ Les résultats ne sont reproductibles que sur un intervalle de mesure donné, choisi pour le régime transitoire. L'opérateur (ou l'algorithme) choisi cet intervalle de temps parmi plusieurs possibles, ce qui influence le résultat final.

pour un couple de valeurs S et K donné. Cet ajustement est réalisé sur des valeurs Infiltration = f(Temps), et non sur leurs valeurs transformées. L'ajustement par inversion' consiste en fait en une **minimisation de la fonction d'erreur**, en testant différentes combinaisons possibles de S et K.

Il existe différents algorithmes d'optimisation dont le point commun est d'essayer d'atteindre une solution minimisant le résultat de la fonction d'erreur en un temps réduit. Comme il est impossible de connaître a priori la valeur minimale de la fonction d'erreur, ces algorithmes procèdent par essais successifs de valeurs de paramètres (ici S et K), le taux de variation des paramètres étant fonction du taux de variation de la fonction d'erreur. L'erreur minimale est considérée comme atteinte quand le taux de variation de l'erreur passe en dessous d'un seuil donné. Ces algorithmes requièrent au minimum que l'utilisateur choisisse les valeurs de départ des paramètres, choix qui peut influencer le résultat final.

Plusieurs stratégies ont été testées afin de contourner les effets indésirables de l'ajustement non-linéaire direct soulignés par Haverkamp (1995) et Vandervaere *et al.* (2000*a*) et de réaliser un ajustement direct acceptable :

- Ajustement direct (de S et de K) 'combiné' sur le régime transitoire et le régime permanent de l'infiltration mesurée. Une telle hypothèse suppose la définition d'une fonction d'erreur qui synthétise l'ajustement sur le régime permanent et celui sur le régime transitoire.
- Ajustement direct (de S et de K) 'combiné' sur le régime transitoire, le régime permanent de l'infiltration mesurée et la différence entre la durée du régime transitoire et le temps de stabilisation. Ce cas de figure suppose la définition d'une fonction d'erreur incluant l'écart entre la durée du régime transitoire et le temps de stabilisation calculé à partir des valeurs de S et K estimées.
- Ajustement direct 'combiné' (de S et de K) sur le régime transitoire et la différence entre la durée du régime transitoire et le temps de stabilisation. L'alternative d'un ajustement sur le régime permanent et l'écart de temps n'est pas réaliste du fait de la durée limitée des mesures d'infiltrations.

L'idée sous-jacente de ces approches est d'introduire dans l'ajustement direct un paramètre – ici l'écart entre la durée du régime transitoire et le temps de stabilisation – qui pénalise la fonction d'erreur si les valeurs de S et de K estimées sont incohérentes par rapport à cet autre critère.

Définition de fonctions d'erreurs pour l'ajustement sur le régime transitoire et celui sur le régime permanent

Les différentes fonctions d'erreur possibles sont exposées au chapitre « Qualité des ajustements : les fonctions d'erreur », en annexe, p. 288. C'est la **RRSEP%**, ou *Relative Root Squared Error of Prediction* (exprimée en %) qui a été choisie ici. Son adaptation aux régimes transitoire et permanent donne les équations suivantes :

J. Moeys | Partie III

$$RRSEP\%_{RT} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{k} (I_{i, mes, RT} - I_{i, est, RT})^{2}}{\sum_{i=1}^{k} (I_{i, mes, RT})^{2}}.100$$

équation 47 – RRSEP% adaptée au régime transitoire de la mesure d'infiltration. Avec RRSEP%_{RT} la RRSEP exprimée en % de l'ajustement entre les valeurs mesurées et les valeurs prédites du régime transitoire ; i la i^e mesure du régime transitoire, i prenant ces valeurs sur [1;k], soit du 1^{er} temps de mesure après le temps d'effet du sable au dernier (k^e) temps de mesure du régime transitoire ;I_{i,mes,RT} la hauteur d'eau infiltrée sous le disque, mesurée au temps i du régime transitoire.

Dans cette équation, on introduit le paramètre k, qui est le numéro du dernier temps de mesure du régime transitoire. Ce dernier peut être choisi par l'opérateur d'après l'allure de la courbe ou fixé après plusieurs essais (Script R).

$$RRSEP\%_{RP} = \sqrt{\frac{\sum_{j=k+1}^{n} (I_{j,mes,RP} - I_{j,est,RP})^{2}}{\sum_{j=k+1}^{n} (I_{j,mes,RP})^{2}}.100}$$

équation 48 – RRSEP% adaptée au régime permanent de la mesure d'infiltration.

Avec RRSEP%_{RP} la RRSEP exprimée en % de l'ajustement entre les valeurs mesurées et les valeurs prédites du régime permanent ; j la j^e mesure du régime permanent, j prenant ses valeurs sur [k+1,n], soit du 1^{er} temps de mesure du régime permanent (égal à k+1) au temps de la dernière mesure effectuée (n) ; $I_{j,mes,RP}$ la hauteur d'eau infiltrée sous le disque, mesurée au temps j du régime permanent.

L'écart au temps de stabilisation, 3^e fonction d'erreur de l'ajustement direct

La fonction d'erreur entre la durée du régime transitoire et le temps de stabilisation, nommée ici 'écart au temps de stabilisation' est basée sur un calcul de RRSEP%. Comme cette erreur ne porte que sur un couple de valeurs, cela revient en fait à la valeur absolue d'un écart relatif :

$$RRSEP \mathscr{V}_{\Delta Tps} = \sqrt{\frac{\left(T_{STAB} - \frac{t_{k} + t_{k+1}}{2}\right)^{2}}{T_{STAB}^{2}}} = \frac{T_{STAB} - \frac{t_{k} + t_{k+1}}{2}}{T_{STAB}}$$

équation 49 – Fonction d'erreur pour l'écart au temps de stabilisation.

Avec RRSEP%_{ΔT_{ps}}, la fonction d'erreur pour l'écart au temps de stabilisation ; T_{STAB} le temps de stabilisation calculé à partir des valeurs de S et de K estimées ; t_k le temps de la k^e mesure, qui est le dernier temps du régime transitoire et t_{k+1} le temps de la $(k+1)^e$ mesure, qui est le premier temps du régime permanent.

Définition d'une fonction d'erreur globale pondérée

Pour pouvoir réaliser l'ajustement direct simultané sur les 3 composantes que sont le régime transitoire, le régime permanent et l'écart au temps de stabilisation, il est nécessaire de définir une fonction unique qui synthétise les 3 autres. Afin de rester dans un cadre cohérent, une pondération a été introduite entre les différentes composantes, ce qui permet de passer d'un cas à l'autre en jouant sur le poids de ces dernières. Ces pondérations sont p_{RT} , p_{RP} et $p_{\Delta T_{PS}}$, pour le régime transitoire, le régime permanent et l'écart au temps de stabilisation respectivement. La pondération des composantes (réel positif) est ensuite corrigée afin d'avoir une somme des pondérations égale à 1 :

$$p'_{RT} = \frac{p_{RT}}{p_{RT} + p_{RP} + p_{\Delta T}} ; p'_{RP} = \frac{p_{RP}}{p_{RT} + p_{RP} + p_{\Delta T}} ; p'_{\Delta T} = \frac{p_{\Delta T}}{p_{RT} + p_{RP} + p_{\Delta T}}$$

de manière à obtenir : $p'_{RT} + p'_{RP} + p'_{\Lambda T} = 1$

équation 50 – Correction apportée à la pondération des 3 composantes de la fonction d'erreur globale de l'ajustement direct.

Avec p'_{RT} , p'_{RP} et $p'_{\Delta T}$, les pondérations corrigées du régime transitoire, du régime permanent et de l'écart au temps de stabilisation respectivement.

La fonction d'erreur globale pondérée se définit ensuite comme suit :

 $RRSEP \mathscr{N}_{globale} = RRSEP \mathscr{N}_{RT} \cdot p'_{RT} + RRSEP \mathscr{N}_{RP} \cdot p'_{RP} + RRSEP \mathscr{N}_{\Delta Tps} \cdot p'_{\Delta Tps}$

équation 51 – Fonction globale d'erreur pondérée de l'ajustement direct.

Avec RRSEP%_{globale} la fonction globale d'erreur pondérée de l'ajustement direct ; RRSEP%_{RT} l'erreur sur le régime transitoire ; RRSEP%_{RP} l'erreur sur le régime permanent ; RRSEP%_{ΔTps}, l'erreur de l'écart au temps de stabilisation.

Le fait que les RRSEP% qui sont additionnées pour calculer l'erreur globale soient des erreurs relatives, exprimées en % de hauteur d'eau infiltrée ou en % d'une durée, permet de minimiser les effets liés aux différences de grandeur qui peuvent exister pour ces deux unités.

Dans la pratique, les valeurs des pondérations p_{RT} , p_{RP} et $p_{\Delta T_{PS}}$, choisies sont égales à 0 ou 1. Une pondération égale à 0 signifiant que la composante n'est pas prise en compte dans l'optimisation, une valeur de 1 signifiant qu'elle est prise en compte. Il pourrait être intéressant de chercher dans quelle mesure des valeurs de pondérations intermédiaires affectent la qualité des ajustements, mais cela dépasse les objectifs de ce travail.

– Fonction 'alternative' d'erreur globale pondérée

La fonction d'erreur globale présentée ci-dessus a l'avantage d'équilibrer correctement l'importance relative des ajustements entre le régime transitoire, le régime permanent et l'écart au temps de stabilisation. On peut argumenter qu'inversement, cette pondération ne reflète pas le nombre de mesures prises en compte pour le régime transitoire et pour le régime permanent. Pour cette raison une 2^e fonction d'erreur globale a été introduite afin de tenir compte du nombre de mesures concernées. Il faut tout d'abord définir une nouvelle fonction d'erreur, commune au régime transitoire et au régime permanent :

$$RRSEP \mathscr{V}_{RT,RP} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{k} (I_{i,mes,RT} - I_{i,est,RT})^{2} \cdot p'_{RT} + \sum_{j=k+1}^{n} (I_{j,mes,RP} - I_{j,est,RP})^{2} \cdot p'_{RP}}{\sum_{i=1}^{k} (I_{i,mes,RT})^{2} \cdot p'_{RT} + \sum_{j=k+1}^{n} (I_{j,mes,RP})^{2} \cdot p'_{RP}}} .100$$

équation 52 – Fonction d'erreur englobant régime transitoire et régime permanent.

Bien que cette équation soit pondérée, le fait que les poids soient fixés à 0 ou 1 rend ce détail inutile ici. Si la pondération du régime transitoire est fixée à 1 et celle du régime permanent à 0, on revient au cas plus simple de la RRSEP%_{RT} exposée plus haut. On voit que, pour une pondération $p_{RT} = p_{RP} = 1$, plus le nombre de mesures inclues dans la phase est importante, relativement à l'autre phase, plus celle-ci va peser dans la RRSEP%_{RT,RP}.

La fonction d'erreur globale devient :

$$RRSEP \, \mathcal{V}_{o_{globale, alt}} = RRSEP \, \mathcal{V}_{o_{RT, RP}} \cdot (p'_{RT} + p'_{RP}) + RRSEP \, \mathcal{V}_{o_{\Delta Tps}} \cdot p'_{\Delta Tps}$$

équation 53 – Fonction d'erreur globale alternative intégrant le nombre de mesures concernées par le régime transitoire et le régime permanent.

Test de différents algorithmes d'optimisation de l'ajustement direct (avec ou sans contraintes)

La fonction d'optimisation (minimisation ou maximisation du résultat d'une fonction en modifiant ses paramètres) de R, 'optim', permet de choisir entre plusieurs algorithmes qui réalisent l'optimisation (à ne pas confondre avec les différentes fonctions d'erreur). Deux algorithmes possibles ont été testés. Le premier est l'algorithme BFGS²⁶, le second est une variante du premier, l'algorithme L-BFGS-B²⁷. Ce dernier permet d'effectuer des **optimisations de paramètres sous contraintes**, c'est à dire **limitées à des valeurs minimales et/ou maximales imposées par l'utilisateur**. Cette possibilité est a priori intéressante, car elle permet d'éviter des valeurs de paramètres aberrantes (S ou K < 0). **Les deux algorithmes ont été testés alternativement**.

□ *Comparaison avec les mesures à la parcelle (Millot, 2004)*

Une série de mesures d'infiltrométrie monopotentiel ont été réalisée en avril et mai 2004 à l'échelle de la parcelle d'étude (Millot 2004), sur l'horizon de surface. Ces mesures, régulièrement espacées sur deux transects emboîtés, étaient destinées à appréhender la structure spatiale des variations de la teneur en eau immobile.

Ces mesures d'infiltrométrie ont été intégrées à la base de données de mesures (« Précisions sur l'organisation et la gestion des données », p. 286, en annexe), au même titre que les infiltrations effectuées à l'échelle du secteur agricole, et traitées de la même manière.

Ce traitement parallèle de deux jeux de données acquis de manière indépendante,

^{26 &}quot; 'BFGS' is a quasi-Newton method (also known as a variable metric algorithm), that [was] published simultaneously in 1970 by Broyden, Fletcher, Goldfarb and Shanno ". Notice de la fonction 'optim', R Development Core Team (2006).

^{27 &}quot; Method 'L-BFGS-B' is that of Byrd et. al. (1995), which allows box constraints, [...]. This uses a limited-memory modification of the BFGS quasi-Newton method. ". Notice de la fonction 'optim', R Development Core Team (2006).

mais provenant du même contexte géo-pédologique, permet d'évaluer les différentes méthodes de calcul en faisant abstraction des éventuels biais liés à la mesure ellemême (erreurs, état du sol au moment de la mesure...). Cela permet en outre de comparer les conductivités et leur variabilité à deux échelles différentes (parcelle et secteur agricole).

■ 4.3 Fraction d'eau immobile

Les résultats concernant cette partie sont exposés p. 183.

Principe

En 1992, Clothier *et al.* ont mis au point une méthode de détermination de la teneur en eau immobile in situ, basée sur l'infiltration successive d'eau, puis d'une solution contenant un traceur inerte avec un infiltromètre à disque.

La première infiltration (qui n'infiltre que de l'eau sans soluté) permet d'atteindre la teneur en eau au potentiel imposé (eau mobile <u>et</u> immobile), ainsi qu'un flux d'infiltration constant (régime permanent). A la fin de la première infiltration, la concentration en traceur (soluté) dans la phase mobile et dans la phase immobile est nulle, celui-ci n'étant normalement pas présent dans le sol, ni dans l'eau infiltrée initialement.

Un échange rapide d'infiltromètre – ou un changement rapide de la solution du réservoir – permet d'infiltrer ensuite une solution contenant le traceur. L'infiltration reprend, au même flux et au même potentiel que précédemment, mais avec cette fois un traceur. Les teneurs en eau mobile et immobile sont normalement inchangées. On peut considérer que **pendant un temps limité, la diffusion du soluté entre la phase mobile et immobile est négligeable**. Comme il n'y a théoriquement pas d'échange d'<u>eau</u> entre la phase mobile et la phase immobile, **la solution contenant le traceur remplace progressivement la solution sans traceur dans la phase mobile du sol, mais pas dans la phase immobile**. La concentration en traceur dans la phase mobile devient égale à la concentration injectée par l'infiltromètre. On peut alors réécrire l'équation 22 (p. 54) de manière à exprimer $\theta_{imm.}$ en fonction de θ , C, C_{mob.} et C_{imm.}, en replaçant $\theta_{mob.}$ par ($\theta - \theta_{imm.}$) (équation 21) :

$$\theta_{imm.} = \theta \cdot \left(1 - \frac{C_{S,globale}}{C_{S,mob.}} \right) = \theta \cdot \left(1 - \frac{C_{S,globale,mesurée}}{C_{S,infiltromètre}} \right)$$

équation 54 – Calcul de la teneur en eau immobile pour une infiltration avec un seul traceur (Clothier *et al.*, 1992) quand les échanges par diffusion sont négligeables.

Avec θ_{imm} [L³.L³] ou (m³.m⁻³) la teneur en eau immobile ; θ la teneur en eau globale du sol au potentiel imposé, mesurée après l'infiltration ; C_{S,globale} [M.L⁻³] ou (kg.m⁻³) la concentration globale en traceur dans la phase liquide du sol ; C_{S,mob.} la concentration en soluté dans la phase mobile du sol ; C_{S,globale,mesurée} la concentration globale en traceur dans la phase liquide du sol mesurée sur l'échantillon prélevé ; C_{S,infiltromètre} la concentration en traceur de la solution injectée par l'infiltromètre.

Lors de la double infiltration décrite ci-dessus, $C_{S,mob.}$ devient égal à la concentration de la solution injectée par l'infiltromètre. $C_{S,globale}$ peut quant à elle être mesurée sur un prélèvement de sol (de volume connu) sous l'infiltromètre, par analyse au laboratoire.

Cette approche pose néanmoins quelques problèmes méthodologiques :

 Le temps d'infiltration doit être suffisamment court pour que l'hypothèse de base d'un d'échange de traceur entre la phase mobile et la phase immobile soit négligeable (à une profondeur donnée).

- Le temps d'infiltration doit être suffisamment long pour que la solution injectée par le 2^e infiltromètre ait eu le temps de remplacer la solution d'eau sans traceur initiale, et cela en tenant compte des effets de dispersion du traceur lors de l'infiltration (à une profondeur donnée).
- L'échantillonnage, destiné à mesurer la concentration en traceur dans le sol à la fin de l'infiltration, doit avoir lieu au milieu du disque d'infiltration, là où l'hypothèse d'écoulement monodimensionnel vertical est respectée.
- La profondeur/hauteur de l'échantillon et le moment de l'échantillonnage doivent être compatible avec les 2 premières contraintes.

Snow (1999) a étudié en détail ces questions et fournit des indications de hauteurs d'eau optimales à infiltrer en fonction du flux en régime permanent, de la valeur du paramètre d'échange par diffusion α [T⁻¹] ou (s⁻¹) et de la dispersivité λ [L] ou (m).

Protocole

Après avoir réalisé une infiltration au potentiel de -1 cm (infiltration servant à estimer S et K comme décrit dans le paragraphe « *Détermination de la conductivité hydraulique au voisinage de la saturation avec un infiltromètre à disque* » p. 100) on remplace l'infiltromètre par un autre, réglé au même potentiel, mais dont le réservoir est rempli d'une solution de Bromure (Br⁻, traceur n'interagissant pas avec la phase solide du sol) à 507 mg.L⁻¹ (+/- 6 mg.L⁻¹).

Le changement doit être rapide, de manière à ne pas affecter excessivement le flux en régime permanent préalablement atteint. Cette deuxième infiltration est prolongée jusqu'à ce qu'une hauteur de 10 mm au minimum ait été infiltrée sous le disque. Bien que cette 2^e infiltration ne serve pas à déterminer K(h), un suivi minimal de la hauteur d'eau infiltrée en fonction du temps est réalisé de manière à pouvoir déterminer après coup le flux en régime permanent et vérifier qu'il est cohérent avec le flux mesuré avant l'application du traceur. Ce flux, et la hauteur d'eau infiltrée doivent permettre de vérifier que les conditions définies par Snow (1999) sont respectées.

A la fin de l'infiltration, le prélèvement à la gouge d'un cylindre de sol de 2,5 cm de diamètre pour 1 à 2 cm de haut est réalisé comme pour une infiltration sans traceur. La teneur en eau massique de cet échantillon est déterminée, comme pour les échantillons de sol sans traceur.

Une fois la masse de sol sec déterminée sur l'échantillon, un volume d'eau de 3 fois la masse de sol sec est ajouté dans le flacon qui contient le sol. Le flacon est agité 24 h dans un agitateur rotatif (REAX 20, Heidolph Instruments, Schwabach, DE) à 15 tours.minute⁻¹. Après agitation, les échantillons sont mis à décanter. Une fois que les particules et colloïdes en solution sont redescendus d'un à deux centimètres, un aliquote de 1,5 mL est prélevé et filtré à l'aide d'un filtre nylon 0,45 μ m (PK/100 Ø 133 mm, Teknokroma, Barcelone, ES) et placé dans un vial en verre.

Un sous aliquote de $50 \,\mu\text{L}$ est ensuite analysé par chromatographie haute pression en phase liquide (HPLC Waters 2695, Milford, MA, USA) sur une colonne échangeuse d'anion (AllSep A-2 Anion, AllTech, Deerfield, IL, USA), poussé par un éluant de carbonate et bicarbonate de sodium (Na₂CO₃ à 2,2 mmol.L⁻¹ et NaHCO₃ à 2,8 mmol.L⁻¹) suivie d'un spectromètre (photodiodes Waters 996) sensible entre 193 et 246 nm (avec un suivi sur 200 nm). Le temps de sortie du bromure est de 5,8 min.

Les aires des pics de bromure détectés sur le spectromètre sont intégrées de manière semi-automatique, avec une vérification / sélection visuelle du début et de la fin du pic, afin de déterminer l'aire du pic.

Une gamme étalon de solutions de bromure à 5, 10, 20 et 50 et 100 mg.L^{-1} est utilisée pour calibrer la relation linéaire [Br⁻] = f(aire du pic), et pour contrôler le temps de sortie du bromure.

Huit échantillons de la solution initiale utilisée pour les infiltrations ont été prélevés durant la campagne de mesure, de manière à contrôler la concentration réelle de cette dernière (risque de dilution accidentelle).

5 Préparation des échantillons de sol avant les mesures avec l'isoproturon

Du fait de l'hétérogénéité de structure (taille des agrégats) et de composition (fragments végétaux, éléments grossiers) des échantillons de sol, il est nécessaire d'homogénéiser les échantillons de sol prélevés avant de les utiliser pour les mesures au laboratoire avec l'isoproturon.

5.1 Tamisage et détermination de la teneur en eau au prélèvement

L'échantillon brut prélevé est séparé en deux sous-échantillons. Le premier n'est pas tamisé tandis que le second est tamisé à 5 mm (tamis à mailles carrées). Avant ce tamisage, il est nécessaire de s'assurer que l'échantillon n'est pas trop humide. L'excès d'eau rend les échantillons de sol collants, et la surface de leurs agrégats se lisse lorsque le tamis est agité. Pour cette raison, les sols trop humides ont préalablement été séchés à l'air jusqu'à ce qu'ils atteignent une teneur en eau satisfaisante, avant d'être tamisés. Environ 1 kg de sol tamisé (agrégats < 5 mm) a été préparé pour chaque échantillon. La partie de sol non tamisée est séchée à l'air plusieurs jours (jusqu'à ce que la teneur en eau ne baisse plus) et stockée à température ambiante avant d'autres utilisations (e.g. analyses physico-chimiques réalisées par la LAS).

L'échantillon tamisé est homogénéisé à la main et 3 prélèvements de 10 à 20 g de sol sont réalisés. Ces prélèvements sont mis dans des petites boites métalliques de masse connue et mise dans une étuve à 105° C durant 48 h afin de déterminer la teneur en eau massique du sol.

Les échantillons tamisés sont ensuite ensachés dans des sacs hermétiques de types Ziplock, dûment annotés, et replacés en chambre froide à 4°C avant leur utilisation.

■ 5.2 Détermination de la teneur en eau à pF 2 après tamisage

La teneur en eau du sol est un paramètre important qui module l'intensité des phénomènes biologiques, physiques et chimiques qui contribuent à la dégradation des pesticides dans les sols. Si la teneur en eau est le paramètre le plus souvent utilisé pour moduler l'intensité de la réaction, les micro-organismes sont aussi sensibles au potentiel de l'eau (qui détermine sa 'disponibilité'). Pour cette raison, les incubations de pesticide réalisées au laboratoire sont réalisées à des teneurs en eau stables dans le

temps et caractéristiques (e.g. capacité au champ). Il est possible d'estimer, par une mesure ou par l'utilisation de fonctions de pédotransfert une teneur en eau massique moyenne à appliquer à tous les échantillons. Dans cette étude, il a été choisi de fixer le potentiel matriciel des échantillons incubés à pF 2, en adaptant pour chaque échantillon la teneur en eau du sol. Cela nécessite une mesure préalable de la teneur en eau au pF 2 de chaque échantillon. Cette détermination doit se faire sur le sol tamisé, pour tenir compte du changement de porosité structurale dû au tamisage.

La teneur en eau massique à pF 2 des échantillons de sol tamisés a été déterminée suivant un protocole similaire à celui exposé dans le paragraphe « Détermination des paramètres de la rétention en eau sur des échantillons de sol », p. 99. Au lieu d'utiliser des cylindres métalliques de prélèvement, des agrégats sont déposés dans des cylindres de PVC de même taille, fermés à leur base par une membrane de nylon du même type que celle utilisée sous les infiltromètres ou sur le bac d'humectation (maille un peu plus large), afin d'éviter que du sol ne s'en échappe. La suite de la procédure est identique. Pour chaque échantillon de sol, **2 répétitions** de la mesure sont réalisées avec, pour chacune d'elle, 25 à 45 g de sol frais utilisé.

Adsorption de l'isoproturon

L'adsorption d'une molécule organique sur la phase solide du sol dépend à la fois des propriétés physico-chimiques d'interaction entre la molécule et la phase solide du sol, de la quantité d'eau présente dans le sol (ratio sol-eau), ainsi que la quantité de molécules présentes dans le sol. Les modèles d'adsorption sont décrits par l'équation 24 et l'équation 25 et illustrée par la figure 9 (p. 58).

6.1 Adsorption linéaire de l'isoproturon sur les sols

Les résultats concernant cette partie sont exposés p. 188.

Principe

6

La mesure de l'adsorption sur des échantillons de sol non perturbés est complexe, car, suivant l'état de remplissage de la porosité du sol par la phase liquide, tous les sites d'adsorption de la phase solide ne seront pas accessibles aux molécules.

On utilise donc des **agrégats de sol** (après fragmentation et tamisage) que l'on place dans un tube (qui n'adsorbe pas ou peu la molécule) avant de le remplir avec une **solution contenant la molécule (isoproturon)**. Le rapport sol / solution est supérieur à ce qui existe dans un sol réel, de manière à ce que les molécules puissent être en contact avec tous les sites d'adsorption. Le tube est **agité 24 h à température constante**, afin de maximiser le contact sol-molécule et de disperser les agrégats. Pendant ces 24 h **un équilibre s'installe entre les molécules adsorbées sur la phase solide et celles qui restent en solution**, et la dégradation de la molécule reste négligeable.

Après l'agitation, les tubes sont centrifugés de manière à plaquer les particules de sol au fond du tube, tandis que la solution, moins dense, reste au-dessus. Un aliquote de **solution** est récupéré afin d'y **doser la concentration en pesticide**. Ce dosage est facilité par le fait que la molécule est **radio-marquée au carbone 14 (noté** ¹⁴C), ce qui permet de la quantifier par comptage des désintégrations, plus aisé que le dosage par

chromatographie.

La demi-vie de désintégration du carbone 14 étant bien supérieure à la durée de l'expérience, il n'est pas nécessaire de tenir compte de ce paramètre dans les calculs : la quantité d'isoproturon dégradée par désintégration du ¹⁴C au cours de l'expérience est très faible au regard du nombre total de molécules.

La masse de sol (phase solide), le volume de solution et la quantité de molécules introduites dans le tube sont connus au départ. La quantité de molécules en solution à l'équilibre (après centrifugation) est mesurée à la fin. On obtient par différence la quantité de molécule adsorbée. **Ces paramètres permettent de calculer le K**_D avec l'équation 24.



figure 30 – Mesures de l'adsorption d'une molécule par agitation d'un tube contenant un mélange eau-sol liquide (mesure en batch).

Avec M_s [M] ou (kg) la masse 'équivalent sol sec'(solide) ajoutée dans le tube ; V_E [L³] ou (m³) le volume de solution ajoutée au tube, solution qui contient une masse M_P [M] de pesticide (ainsi que du CaCl₂) ; $M_{P,E}$ [M] la masse de pesticide dans la solution ; $M_{P,S}$ [M] la masse de pesticide adsorbée sur la phase solide. Le dosage est la quantification de $M_{P,E}$ sur un aliquote de solution.

Protocole

Pour chaque échantillon, 3 g équivalent sol sec sont placés dans un tube à centrifugation en verre Corex (no8446®, USA) de 25 mL de capacité. La teneur en eau du sol est ensuite ajustée, échantillon par échantillon, afin d'atteindre une teneur en eau massique de 1 g pour 3 g de sol sec (par ajout d'eau déminéralisée, en fonction de la teneur en eau initiale des échantillons). Les pesées sont réalisées sur une balance de précision 1 mg (Mettler AE240).

Un volume de 9 mL de solution d'isoproturon à 5,55 mg.L⁻¹ est ensuite ajouté au tube, ce qui donne avec le gramme d'eau déjà présent dans le sol une **concentration** dans le tube de 5 mg.L⁻¹. Le rapport sol / eau est de 3 pour 10 (\approx 1/3). La solution contient aussi du CaCl₂ à 10⁻² M (soit 1,47 g.L⁻¹ de CaCl₂ 2H₂O), afin de rééquilibrer la balance minérale du sol (Wauchope *et al.*, 2002) et d'améliorer la sédimentation des argiles lors de la centrifugation (floculation). La solution apportée est pesée sur une balance de précision 0,1 g (PB 3002-5, Mettler-Toledo). Tous les calculs sont basés sur les masses de sol et de solution effectivement apportés (pesées) et non sur les volumes visés.

Cette dose est proche de la concentration en isoproturon dans la phase liquide du sol lors d'une utilisation agronomique. Au champ, l'isoproturon est apporté à $1\ 200\ g.ha^{-1}$ (maximum légal), ce qui donne pour une épaisseur de $0,05\ m$ de sol, avec une masse

volumique de 1 260 kg.m⁻³, et une teneur en eau massique à pF 2 de 30 %, une dose de 1,90 mg d'isoproturon par kg de sol ou de $6,35 \text{ mg.L}^{-1}$ de solution du sol. La solution d'isoproturon apportée (5 mg.L⁻¹) en est proche si l'on considère la phase liquide du sol, mais éloignée si on considère la phase solide du sol (égale à 16 666 mg.kg⁻¹ de sol). La dose de 5 mg.L⁻¹ a déjà été utilisée par exemple par Walker *et al.* (1999) et Coquet et Barriuso (2002).

La solution d'isoproturon a été préparée à partir d'une solution non marquée (dite solution froide) à 28,49 mg.L⁻¹ (elle-même préparée à partir d'une poudre d'isoproturon, Cluzeau Info Labo, Sainte-Foy-La- Grande, FR) et d'une solution d'isoproturon radio-marquée au carbone 14 à 250 180 DPM. μ L⁻¹ (activité volumique) et 4,06 pg.DPM⁻¹ de pureté (mesurée) 97,5 % (International Isotopes, Munich, DE). Le marquage est sur le cycle de la molécule d'isoproturon. La solution préparée contient 2095 DPM.mL⁻¹. Une fois les 9 mL de solution apportés au tube, et avec les 1 mL d'eau déjà présent dans le sol du tube, la solution dans le tube contient 1886 DPM.mL⁻¹.

Une fois la solution ajoutée, les tubes sont refermés (capuchon hermétique avec un joint en téflon) et agités par retournement durant $24 \text{ h} \text{ à } 22^{\circ}\text{C}$ (+/- 2°C) sur un agitateur rotatif (REAX 20, Heidolph Instruments, Schwabach, DE) à 15 tours.minute⁻¹.

Après agitation, les tubes sont centrifugés durant 15 minutes à une vitesse angulaire de 2098 g (centrifugeuse Evolution RC, rotor SA-600 avec adaptateurs, Sorvall, ThermoFisher Scientific). Les particules solides et l'isoproturon adsorbé sédimentent au fond du tube (culot), tandis que la phase liquide et l'isoproturon en solution restent audessus (surnageant).

Un aliquote de 0,5 mL est prélevé, pesé (précision 0,01 g; AE240 Mettler) et placé dans un flacon de comptage par scintillation (vials polyéthylène 6 mL, PerkinElmer, Waltham, MA, USA) avec du liquide à scintillation Ultima Gold XR (PerkinElmer). Le liquide à scintillation émet de la lumière sous l'effet des radiations qu'il reçoit. Le nombre de désintégrations par minute de la solution est mesuré par un compteur à scintillation TRI-CARB 2100TR (Packard, PerkinElmer) sur une durée de 10 minutes. Le compteur à scintillation mesure en fait le nombre de 'coups par minute' (lumière) émis par le flacon, et les convertit en désintégrations par minute *via* une procédure de calibration.

La mesure permet de calculer la quantité de radioactivité de la solution, d'en déduire la concentration d'isoproturon en solution, et par différence avec ce qui a été apporté d'estimer la concentration en isoproturon sur la phase solide, afin de calculer le K_D .

Trois répétitions sont effectuées pour chaque échantillon.

Quelques mesures d'adsorption (6) ont été réalisées sur des tubes sans sol, afin de mesurer la quantité de pesticide adsorbée sur le verre du tube Corex et sur le joint de téflon du bouchon (usure possible). Le K_D équivalent (avec 3 g de sol virtuellement présent) est en moyenne de $0,06 \text{ L.kg}^{-1}$, avec un maximum à $0,12 \text{ L.kg}^{-1}$ (joint altéré ou erreur ?) et deux valeurs légèrement négatives (du fait de la précision de la mesure ; adsorption nulle en réalité). **Cette erreur représente 5,5 % du K_D moyen mesuré** et approximativement 1/4 du coefficient de variation.

■ 6.2 K_D des horizons de surface et profonds de la parcelle d'étude

Des coefficients d'adsorption avaient été calculés par Alletto (2004) sur des horizons de surface et des horizons profonds dans la parcelle d'étude (au sein du secteur agricole de Ouarville). Le coefficient d'adsorption a été calculé à partir du « temps 0 » des cinétiques de dégradation de l'isoproturon (apport de l'isoproturon sur le sol suivi d'une extraction à l'eau et de 3 extractions au méthanol), et non par des

adsorptions en batch comme décrites ci-dessus. Il est donc difficile de comparer les mesures de K_D des horizons de surface du secteur agricole avec les K_D mesurés sur les horizons profonds.

Des mesures d'adsorption en batch ont donc été conduites sur les horizons prélevés par Alletto (2004), et sur les horizons de 2 nouvelles fosses ouvertes et prélevées en 2005, afin de pouvoir comparer l'adsorption des horizons de surface et celle des horizons profonds de la parcelle. Quatre horizons de surface et 12 horizons profonds de la parcelle ont fait l'objet de mesures de K_D en batch :

- Un NÉOLUVISOL sur limon de Beauce (fosse 1-2, Alletto 2004), avec ses horizons LA, BT2 et BT/C (3 échantillons)
- Un BRUNISOL sur argile à meulière (fosse 2-2, Alletto 2004), avec ses horizons LA et IIIC1.
- Un NÉOLUVISOL sur argile à meulière (fosse 3-2, Alletto 2004), avec ses horizons LA, BT1, IIC et IIIC.
- Un CALCOSOL caillouteux (fosse 4), avec ses horizons LA, S et C.
- Un NÉOLUVISOL sur limon colluvionné, avec ses horizons LA, BT2.1, IIC et IIIC.

Ces échantillons permettent d'ajouter aux mesures de surface des horizons limono-argileux à argileux profonds (dont des horizons dérivés de l'argile à meulière), ainsi que des horizons à fortes teneurs en éléments grossiers et en carbonates.

7 Dégradation de l'isoproturon

Les résultats concernant cette partie sont exposés p. 189.

7.1 Suivi de la dégradation et de la minéralisation sur des incubations au laboratoire

Principe

Le calcul d'un temps de demi-vie de l'isoproturon nécessite un suivi de l'évolution de la concentration en isoproturon dans le sol, en fonction du temps, dans des conditions de température et de teneur en eau constantes. Après un apport initial en isoproturon de masse connue, la molécule est progressivement dégradée et minéralisée. Le suivi de cette dégradation est appelé « cinétique de dégradation ».

Comme pour les mesures d'adsorption, l'utilisation de molécules d'isoproturon radiomarquées au carbone 14 (noté ¹⁴C) sur leur cycle permet de suivre la concentration en isoproturon dans les solutions extraites du sol avec des solvants et permet de connaître la quantité totale de radioactivité présente. Une analyse HPLC sert ensuite à déterminer les proportions d'isoproturon et de ses métabolites dans la radioactivité totale dosée.

Protocole général

La mesure a été conduite en deux séries de mesures, portant sur 25 échantillons chacune. Les incubations des échantillons d'une même série démarrent et se



figure 31 – Incubation de sol avec une solution de ¹⁴C isoproturon pour mesurer la cinétique de dégradation et de minéralisation.

Avec M_s [M] la masse 'équivalent sol sec' (phase solide) ; H_2O la quantité d'eau (V_E) ajoutée pour ajuster le pF du sol à 2 ; Solution : la solution de ¹⁴C isoproturon apportée au sol ; ¹⁴C le carbone 14 (CO₂) issu de la minéralisation de l'isoproturon ; NaOH une solution de soude destinée à piéger le CO₂ émis par le sol (dont le ¹⁴CO₂ de l'isoproturon) ; Jd1, Jd2, ... les jours/temps 1, 2 ... auxquels certains bocaux sont sacrifiés pour un dosage de l'isoproturon dans le sol ; Jm1, Jm2, les jours/temps 1, 2, ... auxquels le pilulier de soude est changé et dosé (sans sacrifice).

Pour chaque échantillon, **8 réplicats sont préparés** avec, pour chacun, 20 g équivalents sol sec placés dans un pilulier (en verre, contenance 60 mL). Trois temps d'extraction (dits 'de sacrifice') sont prévus (dosage de la quantité d'isoproturon restant dans le sol), portant pour chacun d'eux sur 2 réplicats (2 piluliers). Les deux réplicats restant devaient permettre de rajouter un temps d'extraction additionnel ou de palier à la perte éventuelle de certains piluliers. Chaque série comporte donc 200 piluliers.

Les temps d'extraction sont en nombre limité : 3, 14 et 98 jours (nommées t3, t14 et t98). Les répétitions sont nommées A et B.

La quantité d'eau présente dans l'échantillon est ajustée à l'aide d'une propipette. Elle est vérifiée par pesée sur une balance de 0,1 g de précision (PB 300S-S, Mettler-Toledo), pour atteindre 90 % de la teneur en eau de l'échantillon à pF 2 (mesurée préalablement), à laquelle on a retranché 0,5 g, soit la quantité de solution d'isoproturon qui est apportée immédiatement après. Le pilulier entier est ensuite pesé, afin de pouvoir contrôler régulièrement (et ajuster) la teneur en eau de sol mis à incuber.

L'isoproturon radiomarqué est apporté dans 0.5 mL d'une solution à 10 mg.L^{-1} et marquée à $600\ 000\ \text{DPM.mL}^{-1}$. Les $0.5\ \text{mL}$ apportés sont pesés sur une balance de précision 1 mg (AE240, Mettler). C'est la masse de solution effectivement apportée qui est ensuite utilisée dans les calculs.

La solution a été préparée à partir des mêmes sources marquées et non marquées que pour les mesures d'adsorption.

La concentration en isoproturon atteinte dans le bocal au moment de l'apport est de $0,25 \ \mu g$ d'isoproturon . g de sol sec⁻¹ ($0,25 \ mg.kg^{-1}$), et de $939 \ \mu g$ d'isoproturon . L de solution du sol⁻¹. La concentration en radioactivité est de $15\ 000\ DPM$. g de sol sec⁻¹ (soit $300\ 000\ DPM$ par pilulier).

Rapporté à une dose agronomique appliquée par hectare, cette dose est équivalente à un apport de 157,5 g.ha⁻¹ (répartie sur les 5 premiers cm de sol à une masse volumique apparente de 1260 kg.m^{-3} de sol), soit environ $1/8^{\circ}$ de la dose maximale autorisée (1200 g.ha^{-1}).



figure 32 – Extractions successives de l'isoproturon des incubations avec une solution de CaCl₂ et 3 ajouts de méthanol.

Une fois l'isoproturon radiomarqué apporté, le pilulier est placé dans un bocal équipé d'une fermeture hermétique avec un joint de caoutchouc (Le Parfait, 500 mL). Un flacon de comptage par scintillation (polyéthylène, 20 mL, PerkinElmer) est placé à côté du pilulier de sol, avec 2,5 mL de soude à 2M. Un deuxième flacon est placé à côté du premier, contenant 10 mL d'eau distillée, afin de maintenir l'atmosphère du bocal à un taux d'humidité satisfaisant. Le bocal est ensuite refermé hermétiquement. La soude piège le CO₂ de l'atmosphère du bocal, et donc le CO₂ émis par le sol, ce qui inclut le CO₂ issu de la minéralisation de l'isoproturon, quand la chaîne de dégradation arrive à son terme.

Les bocaux (contenant chacun un pilulier de terre et 2 flacons) et ensuite placé dans une enceinte thermostatée à $22^{\circ}C$ +/- $2^{\circ}C$.

La mesure de la quantité d'isoproturon minéralisée ne nécessite pas de sacrifier le pilulier de terre, mais juste de remplacer le flacon de soude et d'effectuer un comptage sur le pilulier remplacé. La minéralisation a été mesurée à 3, 7, 14, 21, 28, 35, 60 et 98 jours (t3, t7, t14, t21, t28, t35, t60 et t98). La 2^e série de mesure n'a pas fait l'objet d'une mesure à 28 jours. La mesure de l'isoproturon minéralisé se fait en ajoutant 10 mL de liquide à scintillation Ultima Gold XR (PerkinElmer) puis mesuré dans le compteur à scintillation TRI-CARB 2100TR (Packard, PerkinElmer) sur une durée de 10 minutes.

À 3, 14 et 98 jours, des bocaux sont sacrifiés. Le contenu du pilulier de terre est vidé dans un tube à centrifugation de 250 mL (copolymère de polypropylène, Nalgene, ThermoFisher Scientific) et 60 mL de solution aqueuse de CaCl₂ à 10^{-2} M est ajoutée et le tube est refermé hermétiquement. Les tubes sont agités 24 h par retournement (REAX 20, Heidolph Instruments, Schwabach, DE) à 15 tours.minute⁻¹.

Les tubes sont ensuite centrifugés à $10\ 000\ g$ durant 15 minutes (centrifugeuse Evolution RC, rotor SA-600 avec adaptateurs, Sorvall, ThermoFisher Scientific). Le surnageant (l'« extrait eau ») est récupéré dans un flacon (verre fumé, $100\ mL$) et pesé sur une balance de 0,1 g de précision. Le flacon est mélangé et 1 aliquote de 0,5 mL est prélevé, placé dans un flacon à scintillation (6 mL, Polyéthylène, PerkinElmer), pesé sur une balance de précision 1 mg (AE240, Mettler), avant d'être mélangés à 4 mL de liquide à scintillation. Le flacon est mis au compteur à scintillation pour déterminer le nombre de DPM qu'il contient (et indirectement le nombre de DPM extrait avec la solution de CaCl₂). Le flacon contenant le reste de la solution est stocké à 4°C jusqu'à l'étape suivante.

Le sol resté dans le tube à centrifuger est ensuite remis en suspension dans 60 mL de méthanol. Comme pour l'extrait à l'eau, il est agité 24 h et le surnageant est récupéré par centrifugation dans un flacon de verre de 180 mL. L'opération est recommencée 2 fois, et les 3 extraits méthanols obtenus sont groupés dans le même flacon. Ce dernier, dont la masse à vide est connue, est pesé avec les 3 extraits méthanol et mélangé. Comme pour les extraits eau, 1 aliquote de 0,5 mL sont ensuite prélevés et mis au compteur à scintillation. Le flacon de méthanol est stocké à 4°C.

A la fin de ces étapes, la quantité de molécules radioactives extractible à l'eau ou au méthanol est connue. Cette radioactivité peut provenir de l'isoproturon, mais aussi de ses métabolites, et plus généralement toute molécule incluant des atomes de carbone du cycle marqué, issue de sa dégradation qui n'ait pas été minéralisée. Il est donc nécessaire de déterminer la guantité d'isoproturon (en proportion de la radioactivité totale) présente dans les deux extraits. Une partie de la radioactivité n'a pas été extraite et reste dans le sol. Il est possible de la doser, mais cette mesure n'a pas été effectuée. Comme dans les extraits à l'eau ou au méthanol, la radioactivité qui reste dans le sol peut être de l'isoproturon, ou ses métabolites. Cette fraction est appelée 'résidus liés', ou 'fraction non extractible', et elle est considérée arbitrairement comme un produit de dégradation de l'isoproturon dans les calculs de cinétique de dégradation. Il est en réalité difficile de savoir si les résidus liés sont de l'isoproturon immobilisé, ou s'ils sont des produits de dégradation de l'isoproturon. La fraction non-extractible peut être importante sur le long terme si la séquestration des molécules s'avère être réversible. Le dosage de cette radioactivité est aussi utilisé pour réaliser des bilans de radioactivité (vérifier qu'il n'y a pas de pertes).





Avec $CaCl_2$ solution aqueuse contenant du $CaCl_2$ et l'isoproturon radiomarqué (¹⁴C IPU) extrait des incubations ; H₂O solution aqueuse ; methOH méthanol ; HPLC analyse par chromatographie liquide haute pression.

L'étape suivante consiste à concentrer les extraits eau et méthanol de manière à obtenir un volume suffisamment concentré en radioactivité pour pouvoir être analysé (détecté) par HPLC.

L'extrait eau est concentré sur une résine (Extraction sur phase solide, copolymère de polystyrène divinyl-benzène, Isolute Env+, IST, Biotage, Uppsala, Suède). La solution aqueuse est passée au travers d'une cartouche de résine préalablement conditionnée (rendements d'extraction de concentration estimés par Alletto (2004) à ~ 95 %). La résine retient l'isoproturon et filtre ainsi l'extrait aqueux. La cartouche est ensuite séchée sous une aspiration modérée, et les molécules piégées par la résine sont reprises par une élution fractionnée de 2 mL de méthanol. Le passage d'une phase aqueuse à une phase organique libère les molécules d'isoproturon, qui sont

récupérées dans les 2 mL de méthanol, dans un flacon de verre. Deux mL d'eau sont mélangés à la solution, et un aliquote de 1 mL placé dans un vial en verre pour être analysé en HPLC. Le mélange eau/méthanol 50 %-50 % améliore la séparation chromatographique.



figure 34 – Concentration par évaporation du méthanol contenant l'isoproturon extrait des incubations.

L'extrait au méthanol (180 mL) est concentré sur un évaporateur rotatif (Rotavapor R-200, Büchi) dont le ballon est maintenu à 60°C par un bain thermostaté (B-490, Büchi) et placé sous vide (rendements de concentration estimés par Alletto (2004) à ~ 90 %). Un à quatre mL sont obtenus en fin d'évaporation, suivant la quantité d'eau qui restait dans le culot des tubes à centrifuger au moment de l'addition de méthanol.

Cet extrait est filtré sur un filtre $0,45 \,\mu m$ en cellulose régénérée (Ø13 mm, AllTech, Deerfield, IL, USA), et un aliquote de 1 mL est placé dans un vial pour être analysé en HPLC.

Les vials issu de la concentration des extraits aqueux sont ensuite analysés par chromatographie liquide haute performance (HPLC), avec séparation sur une colonne Nova Pack C18 (Waters), poussé par un solvant 45 % méthanol et 55 % eau. L'élution dure 45 minutes, avec un débit de 1 mL.min⁻¹. En sortie de colonne, la solution éluée est mélangée à du liquide scintillant (Ultima-FLO AP, PerkinElmer). Un détecteur de radioactivité par scintillation (Radiomatic Flo-One A550, Packard, PerkinElmer) permet de quantifier la radioactivité présente en fonction du temps (chromatogramme).

Les pics présents sur les chromatogrammes et leurs aires sont calculés afin d'en déduire la proportion entre l'isoproturon et ses métabolites.

Un aliquote de la solution initiale utilisée pour les incubations est passé avec chaque série de mesure HPLC (soit toutes les 25 mesures), afin de déterminer le temps de sortie de l'isoproturon dans la colonne HPLC. Cela permet de repérer le pic d'isoproturon sur les chromatogrammes.

Des standards ont aussi été utilisés pour déterminer le temps de sortie de certains métabolites de l'isoproturon. À l'exception du MD-IPU, ces derniers étaient généralement présents en trop faible quantité pour être identifiés de manière fiable. Le suivi des métabolites n'a donc pas été réalisé.

Plusieurs problèmes ont obligé certaines modifications ponctuelles du protocole d'analyse. Les quantités de radioactivité introduites se sont avérées trop faibles pour permettre une quantification fiable de la quantité d'isoproturon présente dans certains extraits aqueux ou méthanol. Le dosage de la radioactivité présente dans les extraits permet d'identifier les échantillons concernés. Suivant la quantité de radioactivité

présente, plusieurs solutions sont mises en œuvre successivement : (i) groupement des répétitions A et B d'un même extrait lors de la concentration (ii) groupement des extraits eau et méthanol après leur concentration (iii) re-concentration des extraits méthanol et eau regroupés dans des ballons de petite taille avec addition d'un petit volume de méthanol pur, ce qui permet un niveau de concentration supérieur par évaporation d'une partie de l'eau résiduelle de l'extrait. Quasiment tous les extraits à 98 jours ont dû faire l'objet de ces regroupements (iii), ainsi qu'une partie des extraits à 14 jours.

La fin de l'incubation de la 2^{e} série a été affectée par un défaut de régulation de la chambre thermostatée qui a engendré durant quelques jours des écarts de température plus importants ($22^{\circ}C$ +/- $4^{\circ}C$) durant 1 à 2 semaines. Ces écarts ne semblent pas avoir eu d'impact sur les demi-vies de l'isoproturon, car aucun effet série n'est détectable sur les résultats (étude par analyse de la variance).

Les temps de sortie de l'isoproturon des extraits méthanol lors de l'analyse HPLC se sont avérés assez variables (temps de sortie de $22 \min$, +/- 1,5 min) du fait des teneurs en eau variables et non maîtrisées des extraits concentrés (eau résiduelle du culot après centrifugation). Les pics ont alors été identifiés relativement au couple MD-IPU / IPU dont les proportions relatives (l'un par rapport à l'autre) se sont avérées assez stables pour un même temps d'extraction.

Cinétique de dégradation et de minéralisation

Le dosage de la quantité de radioactivité [DPM] dans les flacons de soude à différents temps de l'incubation permet de calculer la quantité d'isoproturon minéralisée entre chaque dosage. Si X % de dose de radioactivité introduite au temps 0 est retrouvée dans le dosage du jour 'j' cela signifie que X % de l'apport initial en isoproturon a été minéralisé entre le dosage au jour j et le dosage précédent (si l'on fait l'hypothèse qu'aucune perte n'est survenue et que la soude n'a pas été saturée, ce qui est normalement le cas).

Pour chaque réplicat de sol, la quantité d'isoproturon minéralisée est cumulée entre les différents temps de dosage, de manière à obtenir une **cinétique de minéralisation** (quantité d'isoproturon minéralisée = f(temps)).

Le dosage de la quantité de radioactivité [DPM] dans les différents extraits, associé à la proportion d'isoproturon dans l'extrait mesurée par analyse HPLC, permet de déduire la quantité d'isoproturon extractible du sol au temps d'extraction considéré. Si X % de dose de radioactivité introduite au temps 0 est retrouvée dans l'extrait méthanol du jour 'j', et que l'isoproturon représente Y % de cette radioactivité, cela signifie qu'il reste dans le sol, au jour j, (X %.Y %)/100 [%] de l'apport initial en isoproturon. Contrairement à la minéralisation, il n'est pas nécessaire de cumuler les mesures, et la quantité d'isoproturon dans le sol mesurée à un temps donné est effectuée sur un sous-échantillon (un réplicat) différent à chaque temps de mesure. On obtient une cinétique de dégradation (quantité d'isoproturon restante = f(temps)).

7.2 Estimation des demi-vies de dégradation et de minéralisation

L'estimation de la demi-vie de dégradation ou de minéralisation de l'isoproturon repose sur l'ajustement de l'équation 27 (p. 60) aux cinétiques mesurées. Beulke et Brown (2001) soulignent l'importance du choix du modèle (cinétique de 1^{er} ordre, cinétique bi-exponentielle), du choix de la méthode de calcul des paramètres (par régression linéaire sur des données log-transformées ou par ajustement direct, *voir ci-dessous*), et du choix de fixer ou non la concentration au t_0 (fixée à 100% de l'apport

théorique ou laissée libre). Les auteurs préconisent de tester les différentes possibilités, et de **choisir la méthode la plus adaptée aux objectifs de recherche**. De fait, la plupart des modèles informatiques de comportement des pesticides ne reconnaissent que les cinétiques de 1^{er} ordre. Herman et Scherer (2003) montrent que, pour la régression linéaire sur des données log-transformée, le résidu de régression n'est pas homogène : il est plus élevé pour les concentrations relatives en pesticide proche de 100 % de l'apport. Ce biais n'apparaît pas avec les méthodes non-linéaires. Les auteurs préconisent donc l'approche par ajustement direct, non linéaire, en l'absence d'autres données sur la structure de l'erreur d'ajustement. Dans un travail ultérieur, Herman et Scherer (2006) montrent que si le modèle à simple exponentielle ajusté par une régression non-linéaire (ajustement direct) fonctionne généralement bien, d'autres modèles comme le modèle bi-exponentiel, le modèle 'shift-log' (loi de puissance ?) et le modèle de Monod sont parfois plus adaptés, notamment pour la prédiction de la DT₉₀ (c'est à dire pour la prédiction de la concentration résiduelle en pesticide après un temps long).

Comme les données mesurées sont destinées à être utilisées dans un travail de modélisation, le modèle ajusté ici est une cinétique de 1^{er} ordre. Par contre, plusieurs méthodes d'ajustement ont été testées : ajustement linéaire sur des données log-transformées, avec ou sans calcul de C_0 , et un ajustement direct, non-linéaire. Pour cette dernière méthode, deux variantes ont été testées, avec deux calculs d'erreur d'ajustement différents.

Pour tous les calculs exposés ci-dessous, il a été choisi de considérer que la concentration au temps initial (C_0), non mesurée, correspond à 100 % de l'apport théorique. Les différents calculs de paramètres ont donc été réalisés avec les données mesurées 'plus' une donnée 'arbitraire' $C_0 = 100$ % de l'apport.

■ Ajustement linéaire

Une transformation logarithmique des deux termes de l'équation permet d'aboutir à la relation linéaire :

$$\ln(C_{(t)}) = \ln(C_{(t=0)}) - k \, . \, t$$

équation 55 – Linéarisation de l'équation de dégradation de premier ordre par transformation logarithmique.

Avec $C_{(t)}$ [M de molécule . \hat{M} de sol sec⁻¹] la concentration de la molécule dans le sol au temps t, exprimée en % de l'apport initial ou concentration massique ; $C_{(t=0)}$ la concentration de la molécule dans le sol au temps initial (apport de la molécule au sol), qui sera notée par la suite C_0 ; k [T⁻¹] la constante de dégradation de la molécule.

Il suffit alors de calculer une régression linéaire pour calculer k et C_0 . Les données de $\ln(C)$ tracées en fonction du temps doivent être parfaitement linéaires si l'hypothèse de cinétique de dégradation de 1^{èr} ordre est respectée. Quand cette hypothèse n'est pas respectée, on observe un écart à la linéarité d'autant plus important que l'aspect biphasique de la cinétique est accentué (ou tout autre écart à une cinétique de 1^{er} ordre).

□ *Fixer ou ajuster la concentration initiale*

Le calcul présenté ci-dessus offre deux possibilités quant à la concentration initiale C_0 . On peut considérer que cette dernière est connue, égale à la concentration introduite dans le pilulier de sol au temps 0. L'ajustement linéaire est alors effectué en fixant C_0 . On peut considérer que la concentration effective en molécule juste après l'apport n'est pas exactement égale à C_0 , du fait d'une imprécision du volume de

solution apporté, d'une dégradation partielle lors de l'apport, d'une immobilisation de la molécule (non extractible), ou d'un effet des erreurs de mesures. Dans ce cas, le paramètre C_0 est ajusté avec le paramètre k. Les deux cas de figure ont été testés.

■ Ajustement direct, non linéaire

Comme dans le cas des infiltrations mono-potentielles, il est possible de réaliser un ajustement direct, non-linéaire, de l'équation sur les données. La fonction 'optim' du logiciel R, présentée plus haut (p. 119), permet de faire ces ajustements.

Comme pour les mesures d'infiltrométrie, deux algorithmes d'optimisation de la fonction optim ont été testés : BFGS et L-BFGS-B, le 2^e permettant de réaliser une optimisation avec des contraintes (minimum et/ou maximum de la variable ajustée).

Deux fonctions d'erreur ont été testées, la RRSEP% donnée par l'équation 64 (p. 289) et le MAPE% de l'équation 66 (p. 290), mais le paramètre k a été remplacé dans ces deux équations par $\ln(2)/DT_{50}$. En effet, il faut faire varier k de plusieurs ordres de grandeur pour obtenir une variation d'un ordre de grandeur de l'erreur, tandis que les variations de DT_{50} et de l'erreur sont du même ordre de grandeur. L'optimisation sur la valeur de DT_{50} est donc normalement plus favorable que sur la valeur de k (l'aide de la fonction optim recommande d'avoir autant que possible une variation d'erreur du même ordre que la variation du paramètre).

Il est possible de remplacer l'optimisation non linéaire par une approche plus systématique de criblage des valeurs de DT_{50} possibles sur un intervalle de valeurs plausibles déterminé à l'avance. La méthode consiste à calculer les erreurs d'ajustement pour toutes les valeurs de DT_{50} envisagées, et à choisir la DT_{50} qui donne l'erreur la plus faible. Cette méthode est pertinente dans les cas où il existe plusieurs minimums locaux qui risqueraient de 'tromper' l'algorithme. La méthode permet en outre de repérer ces minimums locaux, ce qui est une information supplémentaire. Les minimums locaux ont été calculés à l'aide de la fonction 'turnpoints' du package additionnel 'pastecs' (v. 1.3-4, Ibanez *et al.*, 2006) du logiciel R (R Development Core Team, 2006). La méthode a été appliquée avec la fonction d'erreur MAPE% (équation 66, p. 290), en lieu et place de la fonction 'optim', pour des raisons développées dans la partie résultats.

8

Méthodes statistiques utilisées pour la caractérisation de la variabilité spatiale des propriétés agro-pédologiques

Les différentes mesures présentées plus haut aboutissent, pour chaque site, à un large éventail de propriétés de natures parfois très différentes. Certaines sont quantitatives, d'autres qualitatives. Certaines ont une distribution qui suit une loi normale, d'autre non. Les objectifs des tests statistiques varient aussi.

Dans un premier temps, un examen des caractéristiques de distribution de chaque propriété permet de la caractériser (centrage, dispersion, quantiles, distribution). Du résultat dépend le choix des tests statistiques qui sont appliqués (paramétriques ou non paramétriques). Les liens éventuels entre les différentes propriétés sont ensuite examinés en prenant les propriétés <u>deux à deux</u>. S'il s'agit de deux propriétés quantitatives, le coefficient de corrélation est calculé, s'il s'agit d'une propriété quantitative et d'une propriété qualitative, une analyse de la variance est effectuée. Le cas échéant, quelques analyses de la variance à deux facteurs contrôlés sont réalisées.

Les liens entre propriétés pouvant être multiples, des analyses en composantes principales sont réalisées sur différents sous-ensembles de propriétés. Elles doivent permettre de dégager les grandes 'composantes' de la variabilité au sein des sols mesurés, et les propriétés qui y sont associées. Ces analyses se basent uniquement sur les propriétés quantitatives, mais il est possible d'examiner visuellement le rôle des propriétés qualitatives par rapport à cette variabilité.

L'objectif étant de pouvoir <u>prédire</u> certaines propriétés 'importantes mais difficiles à mesurer' à partir de propriétés 'plus simples à mesurer' (fonctions de pédotransfert), plusieurs méthodes de 'modélisation statistique' sont mises en œuvre, et leurs résultats testés, afin de définir si ces prédictions sont possibles.

Dans les chapitres suivants, le **terme** de « **propriété** » (dans le sens d'une propriété physique, chimique ou biologique du sol) est préféré au **terme** « **variable** » (au sens statistique du terme), afin de garder une cohérence terminologique entre les chapitres de cette thèse. Les valeurs mesurées/observées d'une propriété sont assimilées à des 'réalisations' d'une variable. Par « propriété qualitative ou quantitative », il faut donc aussi comprendre « variable qualitative ou quantitative ».

■ 8.1 Hiérarchie des propriétés

Le choix et l'ordre des propriétés dans l'application des tests présentés ci-dessus et développés ci-dessous obéissent à une **hiérarchie implicite de ces propriétés**, choisie au préalable. Les propriétés qui sont le plus bas dans la hiérarchie sont théoriquement les plus **simples à mesurer**, au moindre coût, tandis que les propriétés les plus élevées dans la hiérarchie sont les plus **complexes et/ou coûteuses à mesurer**. Comme expliqué plus haut, cette hiérarchie des propriétés n'a pas d'intérêt si le seul but est de comprendre et d'expliquer les observations. Par contre, dans le cadre d'une **prédiction** (fonction de pédotransfert), la hiérarchie est importante, car il est inutile de prédire une propriété facile à mesurer à partir d'une autre plus difficile à mesurer (principe de bon sens donné par McBratney *et al.*, 2002). Selon la même logique, si on a le choix entre deux 'propriétés prédictives' donnant des résultats de prédiction comparables, on choisira la plus simple à mesurer. Inversement, en l'absence de prédictions correctes avec des propriétés simples à mesurer, on pourra en utiliser d'autres 'plus coûteuses', si elles sont inférieures à la propriété à prédire dans la hiérarchie.

La hiérarchie choisie est la suivante : analyses physico-chimiques (granulométrie fine et grossière, carbone organique, CaCO₃) < masse volumique apparente < propriétés décrites par un sondage tarière < propriétés de rétention en eau < conductivité hydraulique < fraction d'eau immobile < adsorption de l'isoproturon < demivie de minéralisation < demi-vie de dégradation.

Bien que l'adsorption soit relativement simple à mesurer, le fait que sa mesure nécessite l'utilisation de molécules radiomarquées la classe parmi les propriétés coûteuses à mesurer.

8.2 Statistiques descriptives

■ Graphiques 'box & whisker'

Les graphiques dit 'box & whisker' (*en français* : 'boite à moustaches'), donnent une vision graphique des quantiles de la propriété. Quand deux graphiques box & whisker sont placés côte à côte, ils permettent une comparaison visuelle de la médiane et des quartiles de deux groupes d'observations. Ces graphiques (figure 35) se présentent sous la forme de boites scindées en deux parties et prolongées de part et d'autre par deux lignes ('moustaches').

- L'axe parallèle à l'allongement des boites (abscisses ou ordonnées selon les cas) donne les valeurs (des quantiles) de la propriété étudiée ;
- L'axe perpendiculaire à l'allongement des boites sépare les différents groupes d'observations comparés. Il est inutile si une seule modalité est étudiée ;
- L'axe central de la boite, qui la scinde en deux parties, représente la valeur médiane de la propriété;
- Les côtés extrêmes de la boite représentent les quartiles (25 % et 75 %) ;
- La zone cintrée autour de la médiane représente l'intervalle de confiance autour de la médiane. Sa largeur est égale à :

$$Q_{50\%}$$
+/-1,58. $\frac{Q_{75\%}-Q_{25\%}}{\sqrt{n}}$

équation 56 – Calcul de l'intervalle de confiance sur la médiane.

Avec $Q_{50\%}$ la médiane ; $Q_{75\%}$ le quartile supérieur, $Q_{25\%}$ le quartile inférieur ; n le nombre de valeurs considérées.

Si le nombre d'observations est faible au regard de la variabilité, les marges de cet intervalle de confiance peuvent parfois s'étendent au-delà des valeurs interquartiles.

 Certaines valeurs sont considérées comme des 'valeurs extrêmes' (ce qui ne signifie pas forcément que ce sont des valeurs aberrantes). Les valeurs extrêmes répondent au critère suivant :

$$x < Q_{25\%} - 1, 5.(Q_{75\%} - Q_{25\%})$$
 OU $x > Q_{75\%} + 1, 5.(Q_{75\%} - Q_{25\%})$

équation 57 – Critère de définition des valeurs extrêmes.

Le coefficient de 1,5 est un paramètre choisi arbitrairement, qui peut être modifié.

Ces valeurs extrêmes sont représentées, si elles existent, par des points dépassant de part et d'autre des figurés (boites et lignes).

- Les deux lignes qui sortent de part et d'autre de la boite s'étendent à la plus petite et à la plus grande valeur non considérée comme une valeur extrême.
- La moyenne des valeurs est fréquemment représentée sur le graphique par un point (distinct de la médiane). Plus la moyenne s'écarte de la ligne médiane, plus la distribution est asymétrique.



figure 35 – Position des différentes statistiques sur un graphique 'box & whisker'.

La partie cintrée de la boite autour de la médiane correspond à une estimation d'intervalle de confiance autour de celle-ci. Exemple sur une distribution log-normale (300 valeurs ; log(moyenne) = 1, log(écart type) = 0,7).

Ces définitions sont données d'après l'aide de la fonction 'boxplot', package 'graphics', version 2.4.1, (R Development Core Team, 2006). Cette fonction a servi à produire les graphiques 'box & whisker' de ce document.

Statistiques de distribution

□ Skewness & Kurtosis

Le skewness et le kurtosis sont deux paramètres statistiques permettant de mesurer respectivement l'asymétrie (autour du paramètre de centrage) et l'aplatissement de la distribution des valeurs (ou son inverse, l'aspect 'pointu'). Ce sont deux paramètres simples qui permettent de comparer empiriquement la distribution d'une propriété avec celle d'une distribution suivant une loi normale. Cette adéquation est une hypothèse de base de nombreux tests statistiques, d'où la nécessité de la vérifier.

Le **skewness** – en français 'dissymétrie' ou 'asymétrie' (ISI, 2007) – mesure la symétrie de la distribution des valeurs autour de sa moyenne. Une distribution centrée aura autant de valeurs supérieures que de valeurs inférieures à sa moyenne.

$$Skewness = \frac{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^3}{(n-1) \cdot s^3} \qquad excès de Kurtosis = \frac{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^4}{(n-1) \cdot s^4} - 3$$

équation 58 – Calculs des paramètres Skewness et (excès de) Kurtosis.

Avec $\bar{\mathcal{Y}}$ la moyenne de la propriété y ; y_i la i^e mesure de la propriété y ; n le nombre de valeurs considérées ; s l'écart type de la propriété y sur les n mesures.

Le **kurtosis** – en français 'aplatissement', 'curtosie' ou 'excès' – mesure le degré d'aplatissement d'une distribution. Le kurtosis est généralement exprimé en terme d'excès (ou de différence de) kurtosis, c'est-à-dire par rapport au kurtosis d'une loi normale, égal à 3. **Pour la simplicité, le terme 'kurtosis' désignera en fait l'excès**

de kurtosis', dans ce document.

L'équation 58 donne le calcul du skewness et du kurtosis. Le tableau 15 donne une indication sur la signification des valeurs de skewness et de kurtosis.

	valeurs	< 0	0	> 0
			- la distribution est -	
Skewness		Étalée à gauche de la moyenne, serrée à droite	Symétrique	Étalée à droite de la moyenne, serrée à gauche
(Kurtosis –	3)	Plus aplatie (que la loi normale)	Aplatissement de la loi normale	Plus pointue (que la loi normale)

tableau 15 – Interprétation des valeurs de Skewness et Kurtosis.

□ *Test de normalité de Shapiro*

Les paramètres skewness et kurtosis permettent d'évaluer la symétrie et l'étalement de la distribution d'une propriété, mais ils ne permettent pas de 'tester' cette normalité, au sens statistique du terme (c'est à dire de calculer la probabilité de rejet de l'hypothèse de non-normalité).

Il existe plusieurs tests permettant tester plus rigoureusement cette normalité. Le test utilisé dans ce document est le test défini en 1965 par Wilk et Shapiro :

$$W = \frac{\left(\sum_{i=1}^{n} x_i \cdot a_i\right)^2}{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2} \text{ avec } x_{i=1} < x_{i=2} < \dots < x_{i=n}$$

équation 59 – Calcul de la statistique W de Shapiro-Wilk.

Avec x_i la ie valeur de x, ces dernières étant <u>ordonnées</u> dans l'ordre croissant de i=1 à i=n. a_i est la valeur attendue de la ie valeur d'une propriété normale ayant la même moyenne et la même variance que X; n est le nombre de valeur de x considérées ; \bar{X} est la moyenne de la propriété x. (source: Regalado 2005).

Plus la valeur du test W s'écarte de 1 (W \leq 1), plus la distribution testée s'écarte de la normalité.

En pratique, on calcule aussi la probabilité P (*p-value*) que l'hypothèse de **non-normalité** soit rejetée. Si l'on choisit une valeur $\alpha/2 = 0.05$ (soit 5%, probabilité 'acceptable' de rejeter de l'hypothèse H₀ de normalité (d'après les observations) alors que la propriété suit 'en réalité' une distribution normale), toute valeur inférieure signifie que la distribution s'écarte de la normalité, et toute valeur supérieure signifie que la distribution est proche de la normalité. **Cette probabilité sera notée 'valeur** P_{W-S}'.

■ 8.3 Statistiques sur des propriétés non-normales

Les résultats correspondant à cette partie sont exposés page 203.

Il peut arriver que les mesures d'une propriété pédologique aient une distribution qui s'écarte plus ou moins fortement de la loi normale. Cela pose un problème méthodologique. Les tests statistiques comme le coefficient de corrélation de Pearson, ou l'analyse de la variance de Fisher, reposent (entre autres) sur l'hypothèse d'une distribution normale²⁸ (Dodge, 1999 & Bouyer, 2000). Bien que

²⁸ Les tests reposant sur cette hypothèse sont appelés tests paramétriques.

ces tests soient relativement robustes, la fiabilité de leurs conclusions est contestable en cas de non-normalité avérée d'une des propriétés étudiées.

Les valeurs prises par une propriété peuvent s'écarter de la normalité pour plusieurs raisons. Les propriétés, qui reflètent des propriétés physiques, chimiques ou biologiques du sol, peuvent suivre 'intrinsèquement' une distribution non normale (asymétrique, et/ou aplatie/pointue). Par exemple, la gamme de valeurs 'habituelles' des conductivités hydrauliques à saturation s'étale sur plusieurs ordres de grandeur. Dans d'autres cas, la propriété peut suivre une distribution relativement proche de la normalité, mais les mesures concernent deux (ou plusieurs) 'populations' (types de sol, pratiques agronomiques) contrastées dont la distribution groupée est bimodale ou plurimodale.

• Cas des populations bi- ou plurimodales

Dans le cas d'une distribution bimodale, il est possible de séparer les mesures en deux groupes distincts, dont les distributions respectives seront normales, et d'effectuer les tests statistiques indépendamment sur ces deux groupes. Cette stratégie n'est envisageable que si le nombre de mesures initiales est suffisamment grand pour permettre des tests statistiques satisfaisant sur les groupes distingués. Une réduction du nombre de mesures testées entraîne en effet une perte de puissance du test statistique (les différences, ou les effets, doivent être plus importants pour être considérés comme statistiquement significatifs). Le nombre d'observations effectuées pour l'étude présentée ici a été jugé trop faible pour tenter de distinguer deux ou plusieurs populations. Cette stratégie n'a donc pas été utilisée ici.

■ Cas des propriétés intrinsèquement non-normales

Dans le cas d'une propriété ayant une distribution 'intrinsèquement' non normale, il est envisageable de transformer celle-ci afin d'obtenir une propriété dérivée qui suive une loi normale. Les tests statistiques sont alors effectués sur la propriété dérivée. Il est par exemple fréquent de travailler sur la racine carrée de la propriété (\sqrt{X}) si celle-ci est un peu asymétrique. En cas d'asymétrie plus forte, une transformation de type logarithmique ($\log_{10}(X)$) sera envisageable.

Une série de transformations a été testée de manière systématique sur les propriétés mesurées qui s'écartent trop de la normalité. Les transformations testées sont les suivantes : X² ; X³ ; ln(X+a) ; log₁₀(X+a) ; e^X ; $\sqrt{(X+a)}$; 1/(X+a) ; $(X+a)^{-2}$; $1/\exp(X+a)$; $1/\ln(X+a)$; $1/\sqrt{(X+a)}$; ainsi que d'autres fonctions puissances et logarithmiques ('a' étant une constante choisie de manière à avoir (X+a) > 0 ou (X+a) < 0, sauf contre-indications ; les valeurs de 'a' testée sont + ou $-(\max(|X|)+\epsilon)$).

Sur chacune de ces propriétés transformées ont ensuite été calculés le skewness, le kurtosis et la *p-value* du test de Shapiro (Royston, 1982, cité par R Development Core Team, 2006). L'ensemble de ces opérations de transformation et de test a été réalisé à l'aide d'un script en langage R (R Development Core Team 2006).

La ou les transformations permettant une normalisation satisfaisante de la propriété a pu ensuite être testée (*au cas par cas*) dans les tests statistiques de corrélation, d'analyse de la variance ou de régression multiple par PLSR.

Tests statistiques non paramétriques

L'utilisation de **tests statistiques** dits « **non-paramétriques** » est une troisième stratégie possible dans le cas de propriétés aux distributions s'écartant

significativement de la normalité. Ils ne reposent pas sur l'hypothèse d'une distribution normale ou d'une distribution suivant une autre loi. Ils utilisent fréquemment le rang des observations plutôt que leur valeur (position d'une observation par rapport aux autres). Le coefficient de corrélation de Spearman peut ainsi remplacer le coefficient de corrélation de Pearson. Le **test de rang de Kruskal-Wallis** (Hollander et Wolfe, 1973, cités par R Development Core Team 2006) peut remplacer l'analyse de la variance à un facteur contrôlé de Fisher. Ces tests sont décrits dans les paragraphes suivants, en parallèle de leurs homologues paramétriques.

8.4 Corrélations entre propriétés quantitatives

Les résultats correspondant à cette partie sont exposés page 203.

L'étude des corrélations, par le calcul de coefficients de corrélation, permet de mesurer le **degré d'association linéaire des propriétés prises deux à deux**. La signification de ces coefficients doit être examinée par des tests appropriés afin de savoir si les liens mis en évidence sont fortuits ou non.

Le coefficient de corrélation de Pearson est le plus courant, mais il présuppose une association linéaire entre propriétés de distribution normale. Le coefficient de rang / corrélation de Spearman est un équivalent non-paramétrique, ce qui permet de s'affranchir des hypothèses de linéarité de la relation et de normalité des distributions.

$$r_{x,y} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x}) \cdot (y_i - \bar{y})}{\sqrt{\left(\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2\right) \cdot \left(\sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^2\right)}} \quad \rho_{x,y} = 1 - \frac{6 \cdot \sum_{i=1}^{n} (rang(x_i) - rang(y_i))^2}{n \cdot (n^2 - 1)}$$

A - Pearson B - Spearman

équation 60 – Coefficients de corrélation de Pearson et de Spearman.

Avec $r_{x,y}$ le coefficient de corrélation de Pearson (*en* : *Pearson product moment correlation coefficient*) entre les propriétés x et y ; x_i et y_i les i^{èmes} valeurs prises par les propriétés x et y ; n le nombre de couples de valeurs {x,y} ; \overline{X} et \overline{Y} les moyennes des propriétés x et y ; σ_x^2 et σ_y^2 les variances de x et y ; $\rho_{x,y}$ le coefficient de corrélation de rang de Spearman ; rang(x_i) et rang(y_i) les rangs respectifs du i^e couple de valeur {x,y} quand les propriétés sont ordonnées indépendamment sur x et sur y. D'après Dodge, 2003.

L'un et l'autre ont été calculés avec la fonction 'cor' et 'cor.test' du logiciel R et évalués selon leur probabilité P^{29} , qui est comparée à la probabilité α^{30} choisie (ici $\alpha = 5\%$).

Ces coefficients de corrélation ne peuvent être appliqués qu'aux **propriétés quantitatives** (e.g. teneur en argile) ou qualitatives ordonnées (e.g. classe de profondeur de sol). Pour tester les liens entre des **propriétés quantitatives et les propriétés qualitatives** non-ordonnées (e.g. type de sol), il faut faire appel à d'autres tests statistiques, comme les **analyses de la variance** (*ci-dessous*).

²⁹ Probabilité d'obtenir une telle corrélation si l'hypothèse H₀ (absence de corrélation entre les variables) est 'en réalité' vraie.

³⁰ Probabilité de conclure que les propriétés sont significativement corrélées alors que l'hypothèse H₀ (absence de corrélation entre les variables) est 'en réalité' vraie.

8.5 Étude des liens entre propriétés qualitatives et propriétés quantitatives par analyse de la variance

Les résultats correspondant à cette partie sont exposés page 210.

Les propriétés qualitatives, aussi appelées propriétés catégorielles, permettent de distinguer des groupes parmi la population initiale (tous les échantillons mesurés). On distinguera *par exemple* les échantillons dont le type de sol est un CALCISOL, ceux dont le type de sol est un CALCOSOL, ceux dont le type de sol est un BRUNISOL, *etc.* Il est possible que certains de ces groupes d'échantillons se distinguent par certaines de leurs propriétés évaluées de manière quantitative (e.g. leurs teneurs en CaCO₃ sont éloignées).

L'analyse de la variance permet de mesurer et de comparer ces liens. On parle souvent de l'effet d'une propriété qualitative sur une propriété quantitative, mais le lien n'est pas forcément un lien de cause à effet.

L'analyse de la variance décompose la variabilité en plusieurs composantes, la variabilité liée à la propriété qualitative (écarts entre la valeur moyenne du groupe et la valeur moyenne globale de la propriété qualitative) et la variabilité interne des groupes (écarts entre la valeur d'une observation et la valeur moyenne du groupe auquel appartient l'observation). Le rapport entre la variance 'entre groupes' et la variance 'intra groupes' de la propriété qualitative est utilisé pour tester l'effet groupe'.

Comme pour le coefficient de corrélation, la valeur P du test est utilisée et comparée à la probabilité α choisie (ici $\alpha = 5\%$) pour déterminer si on peut rejeter l'hypothèse nulle 'il n'y a pas de différences entre les groupes (pas d'effet groupe)'.

La méthode d'analyse de la variance la plus courante est **l'analyse de la variance de Fisher** (Dodge, 1999 ; Bouyer, 2000). Les conditions à respecter pour que le test de Fisher soit valide sont les suivantes :

- La distribution de la propriété quantitative doit être normale ; l'analyse de la variance supporte les écarts 'modérés' à la normalité.
- Les variances des différents groupes distingués par la propriété qualitative sont égales (i.e. les différences entre leurs variances ne sont pas statistiquement significatives). L'analyse de la variance est relativement robuste à la violation de cette hypothèse dans les cas présentant une différence de variance modérée et un échantillonnage équilibré (c'est à dire quand le nombre d'observations dans les différents groupes est identique, ou proche).

En pratique, en science du sol, il arrive fréquemment que ces conditions ne soient pas respectées (par exemple, la distribution de la conductivité hydraulique est fortement asymétrique). Toute la difficulté consiste donc à évaluer si les écarts aux conditions sont rédhibitoires ou non.

L'analyse de la variance de Fisher et le calcul de la valeur P ont été réalisés avec la fonction 'aov' du logiciel R.

La méthode d'analyse de la variance de 'Kruskal Wallis' (*en anglais*: 'Kruskal-Wallis rank sum test) est une analyse de la variance **non-paramétrique**. Elle peut être réalisée sur des propriétés dont la distribution ne suit pas une loi normale. **Par contre**, **l'égalité des variances est une condition toujours nécessaire**. Zimmerman (2000) montre d'ailleurs qu'en présence de variances hétérogènes, le résultat du test peut être fortement biaisé.

Zimmerman (2000) présente aussi les comparaisons de deux moyennes basées sur

J. Moeys | Partie III

un 'test de Student' avec une approximation des degrés de liberté selon Welch 1946 et/ou Satterthwaite 1946 comme une solution au problème d'hétérogénéité des variances, *mais cette alternative ne résout pas le problème de non-normalité de la propriété quantitative*.

L'analyse de la variance de Kruskal Wallis et le calcul de la valeur P ont été réalisés avec la fonction 'kruskal.test' du logiciel R.

8.6 Étude de la variabilité par Analyse en Composantes Principales

Les résultats correspondant à cette partie sont exposés p. 219.

L'étude des coefficients de corrélation ou les analyses de la variance permettent d'étudier un nombre limité de propriétés, souvent prises deux à deux. Or les propriétés de fonctionnement du sol (hydriques, dégradation des pesticides...) sont souvent influencées par de multiples propriétés physico-chimiques 'de base' du sol.

L'analyse en composantes principales (ACP, ou PCA en anglais) permet d'étudier les liens entre propriétés sous l'angle de la variabilité de l'échantillon.

L'analyse en composantes principales détermine des **axes de plus grande variabilité** des observations et de leurs valeurs pour les différentes propriétés mesurées. Ces axes sont définis comme des fonctions des propriétés utilisées dans l'analyse. Les différents axes sont indépendants (orthogonaux dans l'espace multidimensionnel des propriétés), et chacun porte une part de la variabilité (part décroissante avec l'ordre des axes).



figure 36 – Illustration des composantes (axes de plus grande variance) déterminées par analyse en composantes principales sur 3 propriétés corrélées X, Y et Z.

Lorsqu'on étudie les résultats d'une analyse en composantes principales, les résultats sont projetés dans le nouveau système de coordonnées défini par les différentes composantes, et non dans le système de coordonnées défini par les propriétés (X, Y, Z ...) comme illustré ci-dessus.

Ces axes sont appelés **composantes** et ils sont utilisés comme un nouveau système de coordonnées pour visualiser les observations, ce qui permet d'étudier les associations entre propriétés (corrélation positive, négative, indépendance), et de déterminer sur quelles propriétés se distinguent les différentes observations. Ainsi, par exemple, si l'observation O1 à un poids important (et > 0) sur la composante C1, et que la propriété P1 a un coefficient important (et > 0) dans l'élaboration de la composante C1, alors on peut en déduire que la propriété C1 est importante pour discriminer l'observation O1 du reste des observations (variabilité globale), O1 ayant une valeur P1 importante. Si une autre propriété P2 a un coefficient important mais négatif sur C1,

alors O1 se distingue des autres observations par sa faible valeur sur P2.

L'analyse en composantes principales, ne repose pas sur des hypothèses quant à la nature de la distribution des propriétés, elle est donc non-paramétrique (Webster, 2001; Schlens, 2005). L'analyse en composantes principales n'est pas interprétée sous l'angle de test de significativité comme d'autres statistiques. L'analyse en composantes principales décompose la variabilité par des relations linéaires (composante = f(propriétés quantitatives)), ce qui n'est pas toujours la solution la plus adaptée (d'autres méthodes existent pour ces cas de figure ; voir Schlens, 2005).

Par ailleurs, l'analyse en composantes principales ne permet pas de mettre en évidence des liens de cause à effet des propriétés explicatives sur les propriétés d'intérêt, expliquées. Elle met en évidence des liens structurels qu'elle modélise de manière statistique (et non par des modèles physiques) et montre des variations concomitantes des propriétés, et ce pour différentes 'strates' de variabilité. Cela ne constitue pas la preuve d'un lien de causalité, même si c'est un élément pouvant servir à sa démonstration.

8.7 Prédiction des propriétés à l'aide de classes ou de fonctions de pédotransfert locales

Les résultats correspondant à cette partie sont exposés page 230.

Un des objectifs du programme de recherche dans lequel s'inscrit cette thèse est de réaliser des prédictions du comportement de l'isoproturon à l'échelle du secteur agricole étudié. Comme l'échelle de travail et le niveau de variabilité spatiale ne permettent pas d'interpoler les mesures qui ont été effectuées (*voir la partie discussion à la fin des résultats*), il est forcément nécessaire de passer par une couche d'information intermédiaire. Cette couche d'information intermédiaire, 'vecteur de spatialisation', est dans notre cas une carte des sols. Un autre volet du programme de recherche consiste à s'appuyer sur des données satellitales pour prédire les propriétés du sol.

Le passage de mesures ponctuelles à la prédiction spatialisée via une carte de sol n'est pas immédiat. Il est nécessaire d'établir des règles de transfert permettant d'attribuer des propriétés caractéristiques des interactions sol-pesticide en fonction des propriétés du sol (la carte de sol fournissant une estimation de ces propriétés à l'échelle du secteur agricole). Deux manières de procéder sont possibles. La première consiste à établir des 'classes' de sol pertinentes – qui ne sont pas forcément les classes de sol fournies par la carte de sol – et à leur attribuer une valeur moyenne (par classe) du paramètre à prédire. Cette approche est dite « catégorielle » ou « discontinue ». La seconde approche consiste à établir des régressions (fonctions) permettant de prédire une propriété importante à partir de propriétés du sol plus simples renseignées par la carte³¹. Cette approche est une approche continue.

Les propriétés les plus importantes à prédire sont les propriétés hydriques et de transport de soluté (dont la fraction d'eau immobile), l'adsorption de l'isoproturon (K_D , K_{OC}) et sa DT_{50} .

La qualité d'une prédiction est évaluée par validation croisée de type 'Leaveone-out'. La pertinence d'une prédiction est évaluée par rapport à l'erreur moyenne sans prédiction / non-spatiale (basée sur l'écart à la moyenne). Cette erreur peut être exprimée en valeur absolue des écarts ou par une RMSEP (ou RMSEP%).

Une prédiction n'a d'intérêt que si l'erreur moyenne de prédiction est

³¹ Ou par tout autre méthode de prédiction spatialisée, comme l'utilisation d'images satellites.

sensiblement plus basse que l'écart moyen.

Classes de pédotransfert locales

Les prédictions par catégories sont une approche *a priori* séduisante. Sur la base de l'appartenance à l'une ou l'autre des classes définies au préalable, on attribue à la propriété à estimer la valeur moyenne de la propriété dans cette classe. On pourra par exemple estimer la conductivité hydraulique à saturation d'un sol à partir de la conductivité hydraulique moyenne des sols à ambiance carbonatée (RENDOSOLS et CALCISOLS) si le sol appartient à cette catégorie.

Si les analyses de la variance ont révélé le lien entre certaines propriétés qualitatives (segmentées en classes) et certaines propriétés hydriques ou d'interaction sol-pesticide (évaluée de manière continue, quantitative), ces classes peuvent servir de base à une prédiction.

Seulement, il est fréquent qu'une propriété soit modulée selon plusieurs propriétés qualitatives. Les différentes classes de ces dernières ne sont pas liées de manière univoque, du fait de la complexité des relations entre ces propriétés. Ainsi un sol classé comme 'sans éléments grossiers' ne sera pas forcément classé comme ayant un pH inférieur à 7, ou avec une classe de texture 'LA', bien que ces trois catégories soient souvent associés et aient souvent des liens similaires avec d'autres propriétés (voir les résultats).

Par souci de simplicité, seules les propriétés qualitatives dichotomiques (en 2 classes) ont été utilisées. Pour une propriété <u>à prédire</u> donnée, et pour une propriété qualitative-explicative pertinente (révélée par l'analyse de la variance), il est donc possible de définir une classe de valeurs élevées (de la propriété à prédire), et une classe de valeurs basses. L'objectif est de classer la propriété en deux catégories synthétiques, 'valeurs élevées' et 'valeurs basses', mais le résultat n'est pas forcément le même selon la propriété qualitative considérée. Il suffit alors d'établir une règle simple, appliquée à chaque sol ou chaque échantillon, du type « quand plus de N propriétés qualitatives (sur un total de Z pertinentes) classent la propriété d'intérêt dans la catégorie 'valeurs élevées', on classe l'échantillon dans la catégorie des 'valeurs élevées'. Dans le cas contraire, l'échantillon est classé dans la catégorie des valeurs basses ». Toutes les valeurs possibles de N, de 1 à Z, sont testées. La valeur de N qui donne les meilleurs résultats est retenue (critère de validation croisée exposés cidessous).

Une fois l'ensemble des échantillons ainsi classés, on calcule la moyenne de la catégorie 'valeurs élevées' et la moyenne de la catégorie 'valeurs basses'. Lorsqu'il s'agit d'évaluer la propriété d'intérêt sur un sol pour lequel on ne dispose pas de mesure (ou s'il s'agit d'une unité cartographique par exemple), on applique la règle de décision suivante : si ce sol est catégorisé dans les 'valeurs élevées', la valeur estimée de la propriété d'intérêt est la moyenne de la catégorie 'valeurs élevées' précédemment calculée. L'opération est recommencée pour chacune des propriétés d'intérêt à prédire, avec des règles de décisions qui lui sont propres.

Il est possible d'effectuer une validation croisée <u>indépendante</u> '*leave-one-out*' (notée CV-LOO) sur ce type de prédiction afin d'en évaluer la précision.

Fonctions de pédotransfert locales

Une fonction de pédotransfert est une relation statistique permettant d'estimer une propriété d'intérêt (DT_{50} , K_D , K_{OC} , K_S , fraction d'eau immobile...) en fonction d'une ou de plusieurs propriétés plus simples à mesurer (fractions granulométriques, teneur en carbone, teneurs en eau caractéristiques, *etc.*). Les régressions **linéaires**, simples ou
multivariées, sont souvent utilisées pour calculer les fonctions de pédotransfert (du type $y = a.x_1 + b.x_2 + c.x_3... + o$).

□ Approche par régression multivariée : PLSR

La présence de corrélations parmi les propriétés explicatives qu'il est possible d'utiliser pour prédire une propriété d'intérêt pose problème pour la régression multiple calculée par la méthode des moindres carrés. La normalité des propriétés explicatives, ainsi que celle des écarts entre les valeurs réelles et les valeurs prédites (résidus) est une autre condition d'application de la méthode. Des résidus ayant une distribution non-normale (plus importants dans les extrêmes, par exemple) sont observés quand la relation entre les propriétés explicatives et la propriété expliquée s'écarte de la normalité.

La régression (multiple) des moindres carrés partiels (en: PLSR, *Partial least square regression*) est une **méthode adaptée aux cas de propriétés explicatives présentant une forte colinéarité** (les mesures spectrales par exemple). Les conditions de linéarité de la relation, et de normalité des propriétés explicatives sont toujours nécessaires, mais **la méthode supporte une non-linéarité modérée** (Blanco *et al.*, 2000), des résidus importants sur la prédiction (*'noisy data'*: Wold *et al.*, 2001*a*), ainsi que des écarts à la normalité (Chin, 1996). Cependant, **aucune référence n'a pu être trouvée qui évalue les biais consécutifs aux écarts de normalité ou de linéarité**.

La PLSR repose sur les **mêmes bases que l'analyse de la variance**. La méthode utilise une décomposition des propriétés en différentes composantes indépendantes pour élaborer la régression multiple (à partir de ces composantes). Ce calcul en deux étapes permet de s'affranchir des colinéarités entre propriétés explicatives. La méthode est détaillée dans Wold *et al.* (2001*a*).

La PLSR se présente comme une régression en plusieurs strates additives, chacune d'elles expliquant une partie de la variabilité totale de la propriété prédite, à l'image des composantes de l'analyse de la variance.

Cependant, le choix des propriétés utilisées pour la régression, ainsi que le nombre de composantes retenues est délicat. Sélectionner trop peu de propriétés peut aboutir à une prédiction incertaine, et en sélectionner trop à un ajustement de l'erreur (*en anglais*: *'over-fit'*; Thomas, 2003). Il en va de même pour le nombre de composantes.

Le nombre très conséquent de propriétés mesurées ou dérivées des propriétés mesurées – une cinquantaine au total – nécessite la mise en œuvre de **procédures de sélections systématiques des propriétés d'intérêt**, afin de limiter le nombre de propriétés utilisées dans la PLSR et de déterminer lesquelles ont un lien 'réel' avec la propriété d'intérêt. **Plusieurs méthodes existent pour estimer la qualité de la prédiction** (PRESS, VIP), et **plusieurs méthodes existent pour sélectionner les propriétés**. Ces différentes méthodes ne donnent pas forcément le même résultat final.

Les méthodes de sélection du nombre de composantes d'un modèle, de sélection des propriétés sont exposés en annexe (p. 292, « *Choix du nombre de composantes et de variables pour la PLSR* »). Les différents jeux de données à partir desquels ont été réalisées les régressions sont aussi exposés dans cette partie.

Indicateurs de la qualité des prédictions :

Les fonctions de validation croisée '*leave-some-out*' et '*leave-one-out*' sont inclues dans la fonction de calcul de PLSR du logiciel R, ce qui facilite leur utilisation (et réduit notoirement les temps de calculs). Le principe de ces estimations est décrit en annexe,

p. 290 (« Estimation des erreurs par validation croisée »).

Le package 'pls' (Mevik et Wehrens, 2007) du logiciel R – utilisé pour les calculs de PLSR – inclut deux variantes du calcul d'erreur par validation croisée. La première est une fonction indépendante (appelée 'crossval') qui effectue un calcul de validation croisée réellement indépendant, où l'intégralité des calculs de la PLSR est refait à chaque étape. L'autre méthode est directement intégrée à la fonction 'plsr' du package 'pls' (Mevik et Wehrens, 2007). Cette dernière effectue une validation croisée où seule une partie des calculs de la PLSR est re-générée à chaque étape de la validation croisée. Cette méthode n'est donc pas rigoureusement une validation croisée indépendante, mais elle réduit notoirement les temps de calculs (le temps de calcul cumulé de l'ensemble des régressions testées en suivant un même protocole/script dépasse une heure). Des essais de comparaison des deux méthodes ont montré que l'utilisation de la validation croisée 'simplifiée' n'affectait pas trop les résultats de la validation (et surtout les conclusions qu'on peut en tirer). Cette méthode a donc été retenue dans les étapes de sélection de composantes et de sélection de propriétés décrites en annexe.

VIP : influence de la variable pour la prédiction

L'importance/l'influence de la variable (propriété) pour la prédiction (*en anglais*: VIP, 'Variable Importance/Influence in Prediction') est une évaluation globale du poids de la propriété dans la prédiction. Elle repose à la fois sur le pourcentage de variance expliquée par chaque composante, le poids des variables explicatives dans les variables latentes (composantes) et les coefficients de ces variables dans la régression. La VIP a été calculée avec un script en langage R écrit par Bjørn-Helge MEVIK (Mevik, 2006, v1.1), co-auteur du package pls. Ce script se base sur l'article de Chong et Jun (2005). Il est possible de sélectionner les propriétés empiriquement selon leur VIP : si la VIP de la propriété est supérieure à 1, elle est conservée, dans les cas contraire, elle est écartée. Cependant Chong et Jun (2005) montrent que le seuil réel est fonction (i) du degré de colinéarité des variables (ii) de la proportion de variables réellement explicatives dans les variables utilisées pour la prédiction et (iii) de l'homogénéité des coefficients de prédiction. Avec des variables très corrélées, contenant une faible proportion de variables réellement explicatives et des coefficients égaux, le seuil de sélection appliqué à la VIP est supérieur à 1 (jusque 1,2).

Les valeurs et la hiérarchie de la VIP des propriétés se sont avérées assez dépendantes du jeu de donnée initial utilisé. **C'est donc l'erreur croisée** '*Leave-One-Out*' **qui a été retenue, avec une sélection pas à pas** '*forward*' **ou** '*backward*', **pour effectuer une sélection des propriétés de manière semi-indépendante**, la VIP n'étant utilisée que dans un <u>2^e temps</u> pour évaluer l'importance des propriétés finalement retenues.

□ Approche par régression multivariée : GIFI-PLSR

Les GIFI-PLSR³² sont une approche alternative à la PLSR classique qui permet d'utiliser des propriétés non-normales et/ou de mieux modéliser des relations nonlinéaires entre propriétés. Elles ne changent rien au calcul de la régression multiple en elle-même, mais elles utilisent un traitement préalable des propriétés explicatives et/ou expliquées.

La base de la méthode GIFI est une transformation des propriétés en propriétés binaires (ou très simplifiées). Plus exactement, chacune des propriétés est

³² La méthode est-elle nommée en référence au statisticien Albert Gifi ? Ce dernier a en tout cas travaillé sur les analyses multivariées non-linéaires.

Х		X'1	X'2	X'3	X'4	X'5	Х		X'1	X'2	X'3	X'4	X'5
0	->	1	0	0	0	0	0	->	0	0	0	0	0
5	->	1	0	0	0	0	5	->	5	0	0	0	0
10	->	0	1	0	0	0	10	->	0	10	0	0	0
15	->	0	1	0	0	0	15	->	0	15	0	0	0
20	->	0	0	1	0	0	20	->	0	0	20	0	0
25	->	0	0	1	0	0	25	->	0	0	25	0	0
30	->	0	0	0	1	0	30	->	0	0	0	30	0
35	->	0	0	0	1	0	35	->	0	0	0	35	0
40	->	0	0	0	0	1	40	->	0	0	0	0	40
45	->	0	0	0	0	1	45	->	0	0	0	0	45
	méthode A						т	éthode	В				

décomposée en un spectre de propriétés binaires. Chacune de ces propriétés binaires dérivées prend en compte un niveau d'intensité donné de la propriété initiale, selon le schéma ci-dessous :

tableau 16 – Décomposition des propriétés en plusieurs propriétés 'simplifiées' utilisées pour l'approche GIFI-PLSR.

X : propriété explicative, prédictive à utiliser dans la PLSR ; X'1, X'2, X'3, X'4 et X'5 sont les 'bins', propriétés transformées (binaires pour la méthode A), dérivées de la propriété X. Chaque ligne du tableau donne un niveau de valeur des propriétés quantitatives (X) ou des bins.

Le type de propriétés obtenues est appelé en anglais 'bin(s)' si la propriété est binaire, ou '*dummy variable*' si elle est simplifiée mais pas binaire. Si la relation entre la propriété X et la propriété Y n'est pas linéaire, sa simplification en une relation linéaire par la PLSR va engendrer des erreurs plus importantes de prédiction de Y pour certains niveaux de la propriété X. Dans l'approche GIFI-PLS, comme la propriété X est décomposée en plusieurs propriétés X' simplifiées, les coefficients de la PLSR seront adaptés pour chaque niveau d'intensité de la propriété X. L'examen *a posteriori* de ces coefficients permet en plus de diagnostiquer cette non-linéarité. De même, si certains niveaux de la propriété X sont peu importants pour la prédiction (par exemple quand les éléments grossiers sont peu nombreux ou absents ; ou encore quand le sol dépasse une certaine profondeur), la propriété X' dérivée aura des coefficients faibles.

Autre avantage de la méthode, elle permet d'injecter dans la PLSR des propriétés qualitatives (type de sol, strate de l'horizon de surface ...), sans avoir à les hiérarchiser au préalable.

L'inconvénient de cette méthode est qu'elle génère un nombre de coefficients importants qu'il est difficile d'utiliser et de décrire simplement. La réalisation de prédictions suppose aussi de disposer des règles de transformation exactes de chacune des propriétés (limites des différents niveaux de la propriété). Enfin, les prédictions pour des valeurs situées au-delà de l'intervalle de valeurs des propriétés de calibration X sont déconseillées (extrapolation). La méthode B présentée dans le tableau 16 limite quelque peu ces inconvénients.

La méthode est décrite en détail dans Wold et al. (2001b).

Une procédure simple a été implémentée dans un script en langage R afin de tester la méthode GIFI-PLSR. Les règles de transformation des propriétés sont un point important. Il faut déterminer un nombre minimum d'observations non-nulles par bins. Wold *et al.* (2001*b*) recommande que chaque bin possède au moins 10 valeurs non-nulles (10 observations). Avec 50 observations, cela représente une transformation des propriétés en 5 bins maximum chacune. Les intervalles de valeur à appliquer à chaque propriété pour les segmentations ont été déterminés *via* les **valeurs des quantiles** ([minimum-20%[; [20-40%[; [40-60%[; [60-80%[; [80%-maximum]). Cette segmentation doit être suivie d'une élimination des bins redondants ou ne présentant que des valeurs nulles (l'opération est utile pour les propriétés comme la teneur en

CaCO₃ qui présente de nombreuses valeurs nulles avant transformation).

Contrairement à la PLSR simple, la méthode GIFI-PLSR n'a pas fait l'objet d'une procédure de sélection stricte des propriétés. Les jeux de propriétés utilisés ont été sélectionnés sur base des résultats précédents (prédictions catégorielles, PLSR simple), suivie d'une sélection empirique/manuelle de certaines propriétés.

Partie IV Résultats

Variabilité spatiale & déterminisme des processus dans les sols

[...] **Uncertainty** – Do not use PTFs unless you can evaluate the uncertainty, and for a given problem, if a set of alternative PTFs is available, use the one with minimum variance. [...]³³

MCBRATNEY *et al.*, 2002. From pedotransfer functions to soil inference systems. *Geoderma* 109, pp. 41–73. (*cité par MacMillan, 2007*)

³³ « Incertitudes – N'utilisez pas de fonctions de pédotransfert sans en évaluer l'incertitude et, pour un problème donné, si plusieurs fonctions de pédotransfert existent, utilisez celle qui a la plus petite variance » [variance de l'erreur de prédiction] PTFs: PedoTransfer Functions

1 Constituants et organisation des sols

1.1 Propriétés physiques et physico-chimiques des sols

Analyses physiques et physico-chimiques

□ *Granulométries fine et grossière*

Les mesures de granulométries fine et grossière, qui ont été réalisées avec et sans décarbonatation, apportent une information simple, mais essentielle, sur la constitution de la phase solide du sol, et indirectement sur la diversité des matériaux parentaux qui ont pu donner naissance aux horizons dans lesquels ont été prélevés les échantillons.

Le tableau 17 présente les mesures granulométriques non-décarbonatées, le tableau 18 présente les résultats après décarbonatation et la figure 37 place les fractions non-décarbonatées du tableau 17 sur le triangle des textures de la Chambre d'Agriculture de l'Aisne (figure 4, p. 27).

Propriétés [g.kg ⁻¹]	Moyenne	Écart type	CV
Argile (ND) *	266	35	13 %
Limon (ND) *	671	55	8 %
Sable (ND) *	63	29	47 %
Graviers	5	6	115 %
Cailloux	20	21	109 %

tableau 17– Statistiques descriptives des fractions granulométriques non décarbonatées.ND : analyses sans décarbonatation. ; propriétés exprimées en $(g.kg^{-1})$, soit (g de fraction . g de sol sec total⁻¹). * : les fractions argileuses, limoneuses et sableuses sont exprimées en g de fraction par kg de terre fine (c'est à dire sans les graviers et cailloux), tandis que les teneurs en graviers et cailloux sont exprimées en fonction de la terre totale (terre fine + fractions grossières).

Propriétés[g.kg ⁻¹]	Moyenne	Écart type	CV
Argile (D)	263	36	14 %
Limon (D)	674	60	9 %
Sable (D)	54	21	38 %

tableau 18– Statistiques descriptives des fractions granulométriques décarbonatées.D : analyse après décarbonatation.

Il faut noter que le fait que l'échantillonnage soit stratifié verticalement, et qu'a *priori* la granulométrie du sol ne change pas entre les deux strates verticales (ce qui crée des 'doublons'), ne modifie pas théoriquement le coefficient de variation de la mesure. La différence entre le CV de la teneur en argile du lit de semence et celui du reste de l'horizon travaillé est ainsi de 1,5 %.

Les échantillons de surface qui ont été analysés ont une phase solide largement dominée par la fraction limoneuse (67 % de la terre fine en moyenne). La fraction argileuse est deux fois moins importante, 27 % en moyenne de la terre fine, tandis que



la fraction sableuse ne représente qu'une faible partie (6 %).

figure 37 – Textures non décarbonatées des sols du secteur agricole de Ouarville, placées sur le triangle des textures de la Chambre d'Agriculture de l'Aisne. Vue générale et agrandissement.

Ces résultats proviennent des analyses réalisées sur les échantillons prélevés, et non des estimations de terrain.

Les coefficients de variation de ces propriétés sont faibles (13 % pour l'argile, 8 % pour le limon), sauf pour la fraction sableuse (47 %), mais celle-ci est minoritaire.

Les 3 fractions sont très peu affectées par la décarbonatation, ce qui montre que les carbonates ne constituent qu'une part très minoritaire de leurs constituants minéralogiques. Les carbonates sont surtout localisés dans les sables, et plus faiblement dans la fraction limoneuse.

Placées sur le triangle des textures, ces 3 fractions se répartissent dans deux classes de texture, le limon argileux ou l'argile limoneuse. Sur ce triangle, les échantillons se dispersent surtout le long de l'axe des teneurs en argile.

Les graviers et cailloux occupent une part modeste de la masse totale, 2,5 % en moyenne cumulée, mais éminemment variable. Les coefficients de variation de ces deux propriétés dépassent en effet les 100 %.

Propriété [g.kg ⁻¹]	Skewness	Kurtosis	Valeur P _{W-S}
Argile (ND)	0,0	1,1	2,34.10 ⁺²
Limon (ND)	-0,6	-0,2	6,60 .10 ⁻²
Sable (ND)	1,4	3,1	4,40.10 ⁻⁴
Graviers	1,7	3,1	8,80.10 ⁻⁷
Cailloux	1,2	0,3	5,59.10 ⁻⁶

tableau 19– Statistiques de distribution des fractions granulométriques non décarbonatées.ND : analyses sans décarbonatation ; Une valeur du test de Shapiro inférieure à 5.10^{-2} (alpha = 5%) signifie que la normalité n'est pas respectée.

Les statistiques de distribution (tableau 19) des fractions les plus fines, argile et limon, ne s'écartent pas, ou modérément de la normalité (test de Shapiro). Le resserrement apparent (kurtosis) de la propriété 'teneur en argile' autour de son/ses modes cache en fait une distribution d'allure bimodale, comme le montre le graphique ci-dessous :



figure 38 – Histogramme de la teneur en argile (non-décarbonatée).

La courbe en pointillés rouge montre la distribution d'une variable normale de même moyenne et de même variance que la teneur en argile non-décarbonatée.

Les statistiques du tableau 19 indiquent des écarts à la normalité plus conséquents pour les fractions les plus grossières – sable, graviers et cailloux – avec des distributions asymétriques (étalées vers les valeurs élevées) et serrées autour de leur mode (sauf les cailloux). La figure 39 montre les graphiques 'box & whisker' du taux de graviers, de cailloux et d'éléments grossiers totaux³⁴. L'asymétrie des propriétés y apparaît très clairement, notamment pour les éléments grossiers totaux.



figure 39 – Graphique 'box & whisker' des charges massiques des différentes fractions granulométriques grossières (graviers, cailloux et totale).

Ces résultats proviennent des analyses réalisées sur les échantillons prélevés, et non des estimations de terrain.

□ Carbone, azote organique et rapport C sur N

La teneur en carbone organique reflète la teneur en matière organique du sol. La teneur en matière organique est considérée, par convention, comme égale à 1,72 fois la teneur en carbone organique. La matière organique constitue le 2^e élément du complexe argilo-humique du sol, et son importance est capitale pour les propriétés

³⁴ Somme des graviers et cailloux.

physiques et chimiques de sa phase solide.

L'azote total est une propriété chimique mais, au travers du rapport 'carbone sur azote', elle permet d'approcher la nature chimique des matières organiques. Les matières organiques jeunes et peu lignifiées ont un rapport C sur N plus bas que les matières organiques plus décomposées et/ou lignifiée.

Propriét	é	Moyenne	Écart type	CV
C _{ORG.}	[g.kg ⁻¹]	13,5	2,7	20 %
Azote	$[g.kg^{-1}]$	1,3	0,2	17 %
C sur N		10,0	0,6	6 %

tableau 20 – Statistiques descriptives du carbone, de l'azote organique, et du C/N.

Le CV de la teneur en carbone organique est de 22% dans le lit de semence, et de 13% dans le reste de l'horizon labouré.

La teneur en carbone organique est en moyenne de 13,5 g.kg⁻¹ de sol. Si les valeurs s'étalent entre 10 et 20 g.kg⁻¹ (figure 40), la plupart restent dans un intervalle plus modeste (11 à 15 g.kg⁻¹) et le coefficient de variation est modéré (20 %). La teneur en azote, en moyenne 10 fois plus faible que la teneur en carbone organique, a des statistiques très similaires (CV = 17 %).

Le passage en rapport 'carbone sur azote' a pour effet de réduire la variabilité de cette statistique par rapport aux deux autres. Son CV est de 6 % seulement, ce qui montre une certaine homogénéité des matières organiques (de ce point de vue).

Propriété	Skewness	Kurtosis	Valeur P _{W-S}
C _{ORG.}	1,10	0,51	1,65.10 ⁻⁴
Azote	0,6	-0,2	3,5 .10 ⁻²
C sur N	0,3	0,6	2,4.10 ⁻²

tableau 21 – Statistiques de distribution du carbone, de l'azote organique, et du C/N.

NB : la normalité est acceptée quand la valeur P_{W-S} est <u>supérieure</u> ou égale à 5% (5.10⁻²), et non pas l'inverse comme c'est habituellement le cas avec les probabilités P.

La teneur en azote et le rapport C sur N ont des statistiques de distribution qui permettent de les considérer comme normales (ou s'approchant de la normalité), ce qui est confirmé par les graphiques 'box & whisker' (figure 41 et figure 42). L'histogramme de l'azote total montre une distribution qui semble bimodale (graphique non présenté ici), avec un premier pic de valeur vers 1,15 g.kg⁻¹, et un second vers 1,55 g.kg⁻¹.

Les statistiques de distribution de la teneur en carbone organique s'écartent plus de la normalité, avec une légère asymétrie et un aspect 'pointu' se traduisant par un test de Shapiro défavorable.



figure 40 – Graphique 'box & whisker' de la teneur en carbone organique.



figure 41 – Graphique 'box & whisker' de la teneur en azote organique.



figure 42 – Graphique 'box & whisker' du rapport carbone organique sur azote.

\Box Teneur en carbonate de calcium (CaCO₃)

La teneur en carbonates est un paramètre essentiel pour les propriétés chimiques du sol, mais aussi pour mieux comprendre de quels matériaux géologiques dérivent les horizons de surface qui ont été analysés.

Moyenne	Écart type	CV		[g.kg ⁻¹]
8	24	282 %		
Minimum	Q10 %	Q50 %	Q90 %	Maximum
0	0	0	36	153
D'atalla d'ana C				40-13

Distribution : Skewness 4,6 ; Kurtosis 23,7 ; test de Shapiro $3,79.10^{-13}$.

tableau 22 – Statistiques descriptives de la teneur en $CaCO_3$ (en g de $CaCO_3$. g de sol sec total⁻¹).

Les statistiques de la teneur en $CaCO_3$ ne laissent aucun doute sur la forte hétérogénéité de ce paramètre pour les échantillons testés. Sa moyenne n'est que de 8 g.kg^{-1} , mais son écart-type est 3 fois supérieur, et son coefficient de variation approche les 300 % !



figure 43 – Graphique 'box & whisker' de la teneur en CaCO₃.

La figure 43 confirme ce constat. L'asymétrie de la distribution, et sa forme plus pointue, classent cette propriété comme très éloignée de la normalité. La propriété combine une caractéristique de **bimodalité** (absence ou présence de CaCO₃) et d'asymétrie forte (hétérogénéité des teneurs parmi les échantillons contenant du carbonate de calcium).

 $\Box pH$

Si la variabilité de la teneur en carbonate de calcium est très élevée, celle du pH est au contraire modérée. La valeur du pH est en partie liée à la teneur en $CaCO_3$, mais elle dépend aussi des pratiques d'amendement calcaire des agriculteurs, dont l'impact n'est pas forcément visible sur les teneurs en $CaCO_3$ (qui se dissolvent), mais bien sur le pH.

Écart type	CV		
0,7	9 %		
Q10 %	Q50 %	Q90 %	Maximum
6,3	7,4	8,2	8,3
	Ecart type 0,7 Q10 % 6,3	Ecart type CV 0,7 9 % Q10 % Q50 % 6,3 7,4	Ecart type CV 0,7 9 % Q10 % Q50 % Q90 % 6,3 7,4 8,2

Distribution : Skewness –0,2 ; Kurtosis –1,3; test de Shapiro **1,39.10**⁻².

tableau 23 – Statistiques descriptives du pH des échantillons analysés [-].

Comme le montre son kurtosis de -1,3, le pH a une distribution très aplatie, avec

une répartition des valeurs très homogène entre pH 6,5 et pH 8 (figure 44 et histogramme non présenté ici). Le test de Shapiro indique que l'écart à la normalité est significatif.



figure 44 – Graphique box & whisker du pH des échantillons analysés.

■ Masse volumique apparente au cylindre

La mesure de la masse volumique apparente au cylindre est, avec la teneur en carbone organique, une des mesures qui varie le plus en fonction des pratiques culturales.

Moyenne	Écart type	CV		[kg.dm ⁻³]
1,28	0,14	11 %		
Minimum	Q10 %	Q50 %	Q90 %	Maximum
0,98	1,10	1,26	1,46	1,58
	a . a a b i i			1

Distribution : Skewness 0,2 ; Kurtosis –0,5 ; test de Shapiro **8,44.10**⁻¹.

tableau 24 – Statistiques descriptives des masses volumiques apparentes mesurées (g.cm⁻³).

La valeur moyenne de la masse volumique apparente est proche de 1,3 kg.dm⁻³, et son coefficient de variation n'est que de 11 %. Le coefficient de variation d'une telle propriété doit cependant être relativisé au regard des limites physiques des valeurs possibles de masse volumique apparente d'un sol cultivé. Les valeurs inférieures à 0,9 ou supérieures à 1,9 sont rares (quand il ne s'agit pas d'erreurs de mesure), le coefficient de variation de la masse volumique apparente ne peut donc pas dépasser les 20 % (résultat numérique empirique). De ce point de vue les 11 % de coefficient de variation de la masse volumique apparente sont relativement importants.

La propriété est normalement distribuée.



figure 45 – Graphique 'box & whisker' des masses volumiques apparentes mesurées (g.cm⁻³).

■ 1.2 Description des sondages tarière

Matériaux parentaux et substrats

□ Matériaux et successions identifiés

Par souci de synthèse et de clarté, cette partie reprend pour l'essentiel le résultat des observations présentées dans Moeys (2004) ou Moeys *et al.* (2006), qui contiennent déjà l'essentiel des informations données ci-dessous. Cette partie synthétise aussi quelques informations complémentaires dérivées des différentes campagnes de sondage réalisées sur le secteur (Pitres, 2006; campagne de sondages de Moeys & Michelin; sondages tarière des 34 sites échantillonnés pour le

travail présenté ici).

Nous appellerons 'matériaux géologiques' les formations géologiques superficielles qui ont donné naissance aux sols du secteur. Un nombre limité de matériaux géologiques sont présents sur le secteur étudié. Les principaux sont, par ordre d'apparition depuis la surface du sol :

- Le limon des plateaux ;
- L'argile à meulières ;
- L'argile de décarbonatation ;
- Le calcaire Aquitanien.



figure 46 – Symboles utilisés dans les schémas pour les principaux matériaux parentaux du secteur étudié.

Trois matériaux secondaires ont aussi été identifiés :

- Les graviers de Lozère du Burdigalien, qui ne représentent souvent qu'une part très minoritaire de la phase solide, mais qui peuvent être occasionnellement trouvés en grandes quantités (> 20 % du volume du sol ; cas rares ou très localisés dans le secteur).
- Un lœss carbonaté (une seule observation) ;
- Une formation sableuse (deux observations), probablement rattachée au Burdigalien (les sables du Burdigalien ne sont pas rares dans d'autres secteurs de la Beauce). Ces sables sont jaunes orangés mais présentent des incursions plus sombres ou rouge 'lépidocrocite'.

Les deux derniers matériaux n'ont été rencontrés que très localement. Il s'agit donc certainement de formations reliques ayant échappé à l'érosion (ou à l'altération). Les sables ont toujours été trouvés à bonne profondeur (> 1,5 m), dans une situation laissant penser qu'il s'agit d'une poche de dissolution du calcaire remplie de matériaux exogènes.

La succession verticale des principaux matériaux est parfaitement régulière (à l'exception notable des graviers de Lozère), mais il est très fréquent qu'un ou plusieurs matériaux situés au-dessus du calcaire ne soit pas présent.

Sur le terrain, les matériaux présentant des caractéristiques intermédiaires sont nombreux, ce qui suggère des mélanges ou des 'contaminations' respectives. En effet, les processus pédologiques seuls ne peuvent expliquer ces 'variantes'. On rencontre par exemple fréquemment :

- Du limon enrichi en argile et/ou en éléments grossiers de meulières;
 l'enrichissement provient soit d'une illuviation d'argile depuis un horizon supérieur,
 soit d'un mélange avec une formation argileuse (à meulières, de décarbonatation)
 sur laquelle s'est déposé le limon, auquel cas des cailloux sont aussi incorporés;
- De l'argile à meulière contaminée par du limon ;
- Du calcaire altéré avec une importante fraction limoneuse ;



- Du limon carbonaté et/ou contaminé par des éléments grossiers de calcaire.

figure 47 – Schéma des successions de matériaux parentaux observées (ou non) sur le secteur étudié.

NB : La hauteur des schémas ne reflète pas la profondeur du sol. Les situations (c) et (e) n'existent en fait qu'avec un horizon de surface partiellement contaminé par du limon (voir ci-dessous). La situation (a) a été observée très ponctuellement mais très nettement au sud-est du secteur étudié.

Les sols du secteur agricole de Ouarville dérivent donc d'un nombre très restreint de matériaux géologiques qui se succèdent dans un ordre bien précis. Mais de très nombreuses situations intermédiaires dérivant des mélanges de matériaux rendent souvent difficile le rattachement d'un horizon à l'un ou l'autre des matériaux parentaux. Cela est particulièrement vrai pour les situations intermédiaires entre le limon et le calcaire altéré, ou entre le limon et l'argile à meulières, avec des teneurs en argile et des charges en éléments grossiers variables (en quantité comme en nature lithologique).



figure 48 – Matériaux 'intermédiaires' résultants de mélanges sous l'effet de la cryoturbation.

D Profondeur d'apparition du substrat

La profondeur du sol est assimilée à la profondeur d'apparition du substrat. Ce substrat est presque invariablement le calcaire altéré :

La profondeur de sol est assez variable dans le secteur étudié, même si elle se situe dans plus de 50 % de cas entre 50 et 100 cm. Sa valeur moyenne est de 75 cm, avec une asymétrie vers les valeurs fortes qui peuvent dépasser les 2 m. Le coefficient

de variation est de 54%. L'étalement de la distribution vers les valeurs élevées s'explique par la présence de poches de dissolution du calcaire remplies de matériaux meubles. Ces poches sont parfois repérables en surface par une dépression de quelques dizaines de centimètres, mais pas toujours. Bien qu'elles ne représentent sans doute pas une surface importante, ces poches sont assez nombreuses dans le secteur.

Moyenne	Écart type	CV		[cm]
75	41	54 %		
Minimum	Q10 %	Q50 %	Q90 %	Maximum
30	35	65	120	220

Distribution : Skewness 1,5 ; Kurtosis 2,4 ; test de Shapiro 2,75.10⁵.

tableau 25 – Statistiques descriptives de la profondeur d'apparition du substrat (cm).



tableau 26 – Graphique 'box & whisker' de la profondeur d'apparition du substrat.

■ Charges en éléments grossiers

La charge en éléments grossiers évaluée sur le terrain est moins précise et plus subjective que les analyses réalisées au laboratoire, mais elle apporte une information complémentaire sur les horizons situés sous l'horizon travaillé. Il est par exemple possible que le régime hydrique de l'horizon de surface soit indirectement affecté par les charges en éléments grossiers des horizons sous-jacents.

Ces charges en éléments grossiers sont présentées ici sous la forme d'une propriété de synthèse, la charge maximale en éléments grossiers avant le matériau parental. Il s'agit concrètement de la charge en éléments grossiers de l'horizon qui présente le plus d'éléments grossiers. Cette propriété a été déclinée en 3 cas de figures : la charge maximale en éléments grossiers calcaires, la charge maximale en éléments grossiers totaux. La propriété a été extraite de la base de données par des requêtes spécifiques.

Propriété	Moyenne	Écart type	CV
max(%E.G. calc.)	3	5	154 %
max(%E.G. ml.)	6	12	197 %
max(%E.G. tot.)	14	17	124 %

figure 49 – Statistiques descriptives des teneurs en éléments grossiers maximales dans les sondages décrits à la tarière.

max(%E.G. calc.) est la teneur maximale en éléments grossiers (EG) de nature calcaire (teneur de l'horizon qui contient le plus d'EG de nature calcaire), exprimée en % du volume (estimation de terrain); max(%E.G. ml.) est la teneur maximale pour les éléments grossiers de meulière; max(%E.G. tot.) est la teneur en éléments grossiers maximale, quelle que soit la nature lithologique (teneurs cumulées). La teneur totale inclut aussi des éléments grossiers de nature autre que calcaire ou de meulière (graviers siliceux).

Les charges en éléments grossiers évaluées sur le terrain sont en moyenne faibles (3 % pour le calcaire par exemple). Cela reflète une répartition en 3 groupes : les sols sans éléments grossiers, les sols qui en contiennent une part très faible (part 'anecdotique'), et ceux qui ont des horizons avec une présence plus importante d'éléments grossiers. Les 3 propriétés sont éminemment variables (CV entre 125 et

200 %) et fortement non-normales (très asymétriques et parfois 'pointues') comme le montrent les graphiques 'box & whisker' :

Propriété	Skewness	Kurtosis	Valeur P _{W-S}
max(%E.G. calc.)	1,9	3,3	8,37.10 ⁻⁰⁹
max(%E.G. ml.)	2,5	5,2	5,51.10 ⁻¹¹
max(%E.G. tot.)	1,3	0,6	2,24.10 ⁻⁰⁷

figure 50 – Statistiques de distribution des teneurs en éléments grossiers maximales dans les sondages décrits à la tarière.

Une valeur du test de Shapiro inférieure à 5.10^{-2} (alpha = 5%) signifie que la normalité n'est pas respectée.



figure 51 – Graphique 'box & whisker' des teneurs en éléments grossiers maximales des sondages tarière.

Types de sol identifiés

Les 5 types de sol précédemment identifiés sont présents dans l'échantillonnage réalité. Un sixième type s'y ajoute, les PSEUDO-LUVISOLS. Ces sols avaient déjà été décrits précédemment, mais sous l'appellation de LUVISOLS. Il a été décidé d'utiliser cette appellation pour refléter le fait que le contraste de texture observé puisse provenir au moins en partie d'une différence de texture de matériaux parentaux. Le rattachement à cette classe n'exclut donc pas un rattachement possible aux LUVISOLS ou NÉOLUVISOLS. Il est important de marquer cette différence pour plusieurs raisons : (1) s'il est difficile de savoir sur le terrain si la pédogenèse de ces sols est différente de celle des LUVISOLS, leurs matériaux parentaux sont en partie différents (dans un cas le limon seul, dans l'autre le limon déposé sur une formation argileuse) ; (2) si ces sols ont en commun avec d'autres sols un contraste de texture, ils peuvent aussi s'en différencier par les teneurs en éléments grossiers qui accompagnent souvent l'horizon plus argileux (ex. argile à meulière) ; (3) pour les deux raisons précédentes, **la répartition spatiale des PSEUDO-LUVISOLS peut différer de celle des LUVISOLS**. Il est donc utile de les distinguer, au moins dans un premier temps.

La stratification de l'échantillonnage a aboutit à une surreprésentation des sols calcaires (RENDOSOLS, CALCISOLS) sur les autres (8 sites sur 34). Cela biaise un peu l'échantillonnage, mais cela permet au besoin de séparer les sols en deux groupes de

Nombre d'échantillons : lit de semence (reste de l'horizon travaillé)						
Rendosols	CALCISOLS	Brunisols				
1 (0)	7 (4)	10 (17)				
PSEUDO-LUVISOLS	NÉOLUVISOLS	LUVISOLS				
3 (1)	12 (4)	1 (0)				

taille suffisante pour les tests statistiques.

tableau 27 – Contingence des échantillons en fonction du type de sol.

34 sites ont fait l'objet de mesures. L'échantillonnage comprend les 34 lits de semence (1 par site), ainsi que 16 horizons travaillés (sous le lit de semence), soit 50 échantillons.

Les dénominations RENDOSOLS et RENDISOLS, ainsi que CALCOSOLS et CALCISOLS sont soumises à des règles précises décrites dans le RP 1995, basées sur les analyses physico-chimiques. Ne disposant pas d'analyses pour les horizons profonds, on ne peut exclure une erreur de rattachement sur ces types de sols.

De la même manière, l'évaluation des textures à la main, *in situ* ou au laboratoire est une méthode relativement imprécise pour distinguer de faibles différences de teneurs en argile. Des erreurs ne sont pas à exclure sur ces estimations de texture, et donc sur la qualification des contrastes de texture repérés.

Les sols les plus nombreux sont les NÉOLUVISOLS (12 sites), puis les LUVISOLS (10 sites).

■ Modalité de travail du sol (conventionnel – simplifié)

Un tiers des surfaces cultivées du secteur sont en travail simplifié (sans labour). Cette répartition est assez bien respectée dans l'échantillonnage réalisé, avec 24 sites en travail du sol avec labour et 10 sites en travail du sol sans labour. Tous les sites ont vu leur lit de semence inclut dans l'échantillonnage, mais seuls 16 sites ont fait l'objet d'un prélèvement de l'horizon travaillé sous le lit de semence. Cet échantillonnage est équilibré, afin de permettre d'effectuer des tests statistiques avec suffisamment d'observations dans chaque groupe (8 et 8).

Nombre d'échantillons : lit de semence (reste de l'horizon travaillé)				
Travail conventionnel	Travail simplifié			
24 (8)	10 (8)			

tableau 28 – Contingence des échantillons en fonction de la modalité de travail du sol (conventionnel – simplifié).

Répartition spatiale des sols et de ses propriétés physico-chimiques

Tirer des conclusions sur la répartition spatiale des sols et de leurs propriétés sur la base de 34 sites est un exercice incertain. Les constats exposés cidessous sont donc à prendre avec précaution. Le premier facteur/indicateur 'externe' qui doit être examiné est la topographie. Celle-ci est (1) peu marquée et (2) caractérisée par une zone de **plateau**, située autour de Ouarville–Ossonville, progressivement ridée par de petits **talwegs**, à mesure que l'on s'éloigne de cette zone. Le terme « progressif » est essentiel car on peut repérer à l'œil nu la naissance d'une **microtopographie**, aux abords de Ouarville (observations de terrain). Au premier abord, l'examen des cartes présentées en annexe (p. 304) ne semble pas permettre de lier la profondeur du sol, la teneur en argile, la teneur en $CaCO_3$ ou en éléments grossiers à une position 'de plateau' ou 'de talweg'. Pour la **profondeur du sol**, ce constat visuel a été confirmé par des statistiques (*non-présentées ici*) tirées de la base de sondages ayant servi à élaborer la carte des sols du secteur (figure 19, p. 82) : **il ne semble pas y avoir d'effet 'pente', ou d'effet 'orientation de pente' sur ce paramètre**.

Un examen visuel de la carte topographique (p. 73), de la carte géologique (p. 80) et des cartes des propriétés, montre que le **secteur nord-est** présente à la fois une topographie de petits talwegs plus marquée qu'ailleurs et une épaisseur de limon des plateaux moindre. Or, on constate que c'est aussi dans ce secteur qu'on trouve le plus de sols peu profonds, avec une teneur en argile, en carbonates et en éléments grossiers plus élevés (observation en accord avec la carte des sols et les conclusions de Delmas, 2007). Cependant, de tels sols sont observés ailleurs sur la carte.

La seule conclusion qui peut être raisonnablement tirée sur la répartition spatiale des types de sols est liée aux matériaux géologiques : les **RENDISOLS**, **CALCOSOLS** et **CALCISOLS** sont par définition les plus carbonatés, logiquement peu épais (puisque le carbonate provient du calcaire sous-jacent) et sont plus spécifiquement présents dans le secteur nord-est, là où le relief est plus marqué.

Après avoir 'réinterprété'³⁵ les fiches de sondage de la carte des sols du secteur, Delmas (2007) a montré qu'un large **quart nord-ouest** (et une petite zone autour du bois du secteur nord-est) comporte de fréquents **plaquages d'argile à meulière**, et une **teneur en argile de surface plus élevée**. L'auteur montre aussi que les **sols les plus épais**, et les plus limoneux, sont situés sur le **plateau** 'Ossonville-Ouarville'. Cependant, le travail de Delmas (2007) montre que la cartographie des matériaux parentaux – et plus encore celle des sols – est très difficile à l'échelle considérée (1/25 000). Moeys *et al.* (2006) ont montrés que la cartographie des sols était possible à l'échelle parcellaire (20 ha), mais les moyens sont autrement plus importants que dans le cas de la carte des sols du secteur (prospection pédologique dense + mesure géophysique).

Les observations de terrain montrent qu'il est difficile de différencier un **PSEUDO-LUVISOL** d'un **NÉOLUVISOL** ou d'un **LUVISOL** (sans analyses physico-chimiques). La confusion est encore renforcée par le fait qu'il existe très certainement des **intergrades** (**NÉOLUVISOLS** développés dans une argile à meulière).

Les observations de terrain (prospection Moeys et Michelin ; Delmas, 2007) laissent aussi penser que certains **NéoLuvisoLs** situés en bordure de talwegs sont tronqués (couleur de surface plus rouge), d'où une teneur en argile de surface plus élevée et un contraste de teneurs en argile <u>absent</u> dans le profil (puisqu'il est tronqué). Combiné à la difficulté d'évaluer correctement la texture sur le terrain, ce constat laisse supposer que des erreurs de diagnostic sont possibles pour les **NéoLuvisoLs Tronqués**, qui peuvent être diagnostiqués en **BrunisoLs**.

Il n'est pas certains que ces types de sols (**PSEUDO-LUVISOLS**, **NÉOLUVISOLS** (tronqués), **LUVISOLS**, **BRUNISOLS**) se différencient beaucoup du point de vue de leur fonctionnement (sauf un effet possible des éléments grossiers et/ou de la structure sur le régime hydrique), mais leur **répartition** obéit à des **logiques différentes** (géologiques et/ou pédologiques). Ces **erreurs possibles de diagnostic diminuent la fiabilité de leur cartographie**.

³⁵ Le matériau 'argile à meulière' n'était pas explicitement renseigné sur les fiches. La combinaison des critères 'teneur en argile élevée' et 'présence en quantité non négligeable de meulières' est cependant un bon critère pour identifier la formation.

1.3 Synthèse, discussion et conclusion intermédiaire

Les résultats présentés ci-dessus sont relativement cohérents avec ce qui avait été observé à l'échelle de la parcelle d'étude (Moeys *et al.*, 2006). Le secteur étudié présente **une certaine variété de matériaux géologiques parentaux** (source d'hétérogénéité), se **superposant** selon une **logique bien définie**, mais avec de **très nombreux faciès intermédiaires** vraisemblablement hérités des phénomènes périglaciaires. Ce dernier point peut être vu alternativement comme une **hétérogénéité interne** des matériaux ou comme une **absence de limite nette** entre les **types morphologiques** de matériaux. Les matériaux identifiés sont, de bas en haut, le calcaire gélifracté et cryoturbé, quelques passages d'argile de décarbonatation, notamment dans les avens, une éventuelle couche d'argile à meulières, puis un limon d'épaisseur variable, quasiment toujours observé.

La logique qui lie les propriétés de surface du sol à ses matériaux parentaux sera discutée plus loin, après examen des liens statistiques entre les différentes propriétés mesurées.

Les résultats d'analyse présentés ci-dessus montrent que les échantillons prélevés dans les horizons de surface sont de nature essentiellement limoneuse, avec une teneur en argile a priori suffisante pour leur conférer de bonnes qualités agronomiques (battance possible mais pas excessive, bonne réserve utile), sauf quand le sol est peu épais et/ou caillouteux. La dominante limoneuse de la fraction granulométrique, et la faible abondance générale des carbonates, exclu que les horizons de surface dérivent du calcaire seul : la dissolution du calcaire donne un matériau très argileux (argile de décarbonatation ou argile à meulière). Le principal matériau parental est de toute évidence le limon éolien. Il est difficile d'estimer la teneur en carbonate de ce dernier au moment de son dépôt. Si les carbonates représentaient une part importante des constituants du lœss, les sols ont été décarbonatés par la suite. Deux indices concordants laissent penser qu'il était peu (ou pas) carbonaté : (i) les sols sont peu épais et reposent sur du calcaire, ce qui aurait dû ralentir la décarbonatation (ii) à une seule exception (reliquat de 10 cm d'épaisseur, en plein cœur du plateau), le lœss carbonaté n'a pas été retrouvé (pas même dans les avens karstiques, qui accueillent pourtant divers reliques de formations géologiques meubles qui ne sont plus visibles ailleurs).

La teneur en argile de surface présente une distribution bimodale. Deux explications sont possibles : comme montré par Moeys et al., 2006, les sols peu épais sont aussi généralement les plus argileux du fait de la dissolution du calcaire à l'interface avec le sol (moins basique) et de la présence possibles d'argiles à meulières ou de décarbonatation sur le calcaire. Mais les observations de terrain ont aussi montré qu'il peut s'agir de sols lessivés tronqués, dont l'horizon BT, plus argileux, est affleurant. L'observation des cartes de profondeur du sol et de teneurs en argile et en CaCO₃ (p. 304) laisse penser que la première hypothèse est la bonne, mais cela n'exclu pas un effet des sols tronqués. En comparaison des données de la littérature présentée dans la partie bibliographie, les teneurs en argile des échantillons ont un faible coefficient de variation (inférieur à la limite inférieure proposée par Mulla et McBratney, 2002). Cela montre que les contaminations (d'argile) par les horizons d'argile de décarbonatation ou d'argile à meulière, fréquentes dans la partie basse du profil, sont limitées en surface. Il existe probablement un gradient de teneur en argile depuis ces couches de sol argileuses vers le limon de surface, le mélange argile-limon étant plus important au début du dépôt du lœss, puis il s'atténue.

La distribution des teneurs en $CaCO_3$ est aussi **bimodale** (dans le sens absence / présence). Cette **bimodalité** montre probablement un effet seuil de la profondeur du sol : si les sols ont plus de 30 ou 40 cm d'épaisseur, les éléments grossiers ne sont pas remontés par le labour, et ceux qui sont présent finissent par être dissous et lessivés. Cette hypothèse doit cependant être modulée par les différents apports anthropiques possibles : amendements calcaires et effets des anciens chemins ou des bords de parcelle empierrés.

Les amendements calcaires sont aussi très certainement à l'origine de la relative homogénéité du pH.

La **profondeur médiane des sols, 65 cm**, contrastent avec ceux de Delmas, 2007 qui trouvait que « la plupart des sols ont une profondeur supérieure à 60 cm » dans le même secteur. Cela reflète le biais induit pas l'échantillonnage stratifié, qui surreprésente les sols peu épais. La présence d'avens karstiques (peu visible en surface et remplis de matériaux exogènes) **et autres accidents géologiques**, explique sans doute la non-normalité de la distribution de la profondeur des sols.

Comme pour la teneur en argile, la teneur en **carbone organique** est relativement **peu contrastée au regard des données de la littérature**, et ce **malgré la présence de modalités de travail du sol contrastées**. Seuls Walker *et al.* 2001 obtiennent un CV plus bas, de 9 % (sur 1,5 ha). Les autres articles étudiés indiquent des CV bien supérieurs à 20 %. Le coefficient de variation du C/N semble indiquer que leur nature est peu variable. Les raisons de la faible variabilité de la teneur en carbone organique et du C/N reflètent certainement la vocation essentiellement céréalière du secteur, où les exploitations de polyculture-élevage et les prairies ont disparu depuis longtemps.

Exception faite de la teneur en éléments grossiers et en carbonates, le seul paramètre qui apparaisse vraiment variable est la **masse volumique apparente**. Son **CV** est en accord avec les données de la littérature. Il n'en est pas moins **élevé**. Si l'on se réfère à l'équation 4, p. 32, les principales sources de variabilité sont la granulométrie, la teneur en carbone organique et le travail du sol. Les deux premières propriétés sont classées comme 'peu variables' dans le secteur. Les effets du travail du sol semblent donc la principale cause de variabilité de la masse volumique apparente (voir plus loin le tableau 67, p. 212). **On peut se demander si la variabilité de la masse volumique apparente reflète une variabilité de la structure de l'horizon de surface, mais aucune mesure n'est disponible sur ce point.**

2

Propriétés hydriques du sol

Les propriétés hydriques du sol – de rétention en eau et de conductivité hydraulique – sont deux propriétés essentielles du sol. Elles permettent de décrire le stockage et les flux de la phase liquide dans le sol.

■ 2.1 Rétention en eau

Les matériels et méthodes de cette partie sont exposés page 99.

Les paramètres de la fonction de rétention en eau de Campbell (θ_s , h_A et b) suffisent à décrire cette propriété physique. Il est cependant indispensable de présenter les propriétés mesurées qui ont permis de calculer ces paramètres, les teneurs en eau au pF 2 et 4,2. Ces deux propriétés sont importantes pour évaluer les potentialités agronomiques des sols (ici de l'horizon de surface), au travers de la réserve utile de l'horizon notamment.

Relation potentiel matriciel – teneur en eau



figure 52 – Graphiques box & whisker des teneurs en eau [cm³.cm⁻³] mesurées à différents potentiels matriciels caractéristiques (saturation, pF 2 et pF 4,2) & de la réserve utile estimée.

Avec R.U. la réserve utile <u>de l'horizon</u>; 'theta pF4,2', 'theta pF2' et 'theta sat.' les teneurs en eau volumiques à pF 4,2, à pF 2 et à saturation (h=0).

Propriété	Moyenne	Écart type	CV
$\theta_{\rm S}$	0,46	0,05	10 %
θ(pF 2)	0,34	0,03	10 %
θ(pF 4,2)	0,18	0,03	16 %
θutile	0,15	0,03	20 %

tableau 29 – Statistiques descriptives des teneurs en eau volumiques mesurées à différents potentiels matriciels caractéristiques (saturation, pF2 et pF4,2) et de la réserve utile estimée. [g.cm⁻³].

La teneur en eau utile, notée ' θ utile', est égale à θ (pF 2) - θ (pF 4,2).

Les teneurs en eau caractéristiques ont une variabilité limitée, avec des coefficients de variations de 10 % pour la teneur en eau à saturation et au pF 2, pour des moyennes de 0,46 et 0,34 cm³.cm⁻³ respectivement. La teneur en eau au pF 4,2, point de flétrissement permanent, est plus variable, avec un CV de 16 % pour une moyenne de 0,18 cm³.cm⁻³. La réserve utile correspond en moyenne à 15 % du volume total du sol.

Propriété	Skewness	Kurtosis	Valeur P _{W-S}
$\theta_{SAT.}$	1,2	2,1	1,34.10 ⁻³
$\theta(pF2)$	0,5	0,2	2,80.10 -1
θ(pF4,2)	0,8	-0,2	7,70.10 ⁻³
θutile	0,2	-1,1	1,02.10 ⁻¹

tableau 30 – Statistiques de distribution des teneurs en eau mesurées à différents potentiels matriciels caractéristiques (pF 0, 2 et 4,2) et de la réserve utile estimée.

La teneur en eau à pF 2 et la réserve utile ne s'écartent pas significativement de la normalité. Les teneurs en eau à saturation et au pF 4,2 s'en écartent un peu, du fait d'une asymétrie et d'un aplatissement pour la première, et du fait d'une distribution un peu asymétrique pour la seconde.

Comme le montre son kurtosis de -1,1, la réserve utile a une distribution un peu aplatie.

Paramètres de la fonction de rétention de Campbell

La fonction de rétention de Campbell comprend 3 paramètres : la teneur en eau à saturation θ_s , le potentiel au point d'entrée d'air h_A , et le paramètre de forme b, lié à la pente. La teneur en eau à saturation est mesurée directement au laboratoire, les paramètres h_A et b sont calculés selon la méthode de Cresswell et Paydar (1996) décrite plus haut (équation 30, p. 99).

Propriété	Moyenne	Écart type	CV
h _A [m]	-0,13	0,15	-109 %
b[-]	8,7	2,1	24 %

tableau 31 – Statistiques descriptives des paramètres de la fonction de rétention en eau de Campbell.

Le potentiel au point d'entrée d'air h_A , qui représente l'extension de la limite de teneur en eau au voisinage de la saturation, est en moyenne de -0,13 m, ce qui correspond à un pF proche de 1 (potentiel relativement bas). Le coefficient de variation dépasse les 100 %. Le paramètre 'b', lié à la décroissance des teneurs en eau sur l'axe des potentiels a un coefficient de variation de 25 %, pour une moyenne de 8,7.

Propriété	Skewness	Kurtosis	Valeur P _{W-S}
h _A [m]	-1,6	2,1	8,03.10 ⁻⁷
b[-]	0,9	-0,2	5,24.10 ⁻⁴

tableau 32 – Statistiques de distribution des paramètres de la fonction de rétention en eau de Campbell.

Le potentiel au point d'entrée d'air présente une asymétrie prononcée vers les valeurs faibles (négatives), et de fait présente un resserrement de sa distribution autour de sa moyenne. La propriété s'écarte nettement de la normalité. La distribution du paramètre 'b' est moins asymétrique, mais elle s'écarte un peu de la normalité.



figure 53 – Graphique 'box & whisker' du paramètre h_A de Campbell.

Il est probable que les 3 valeurs extrêmes situées en-deçà de -0,4 m soient des valeurs aberrantes. De telles valeurs signifient que θ_{SAT} est proche de $\theta(pF2)$.





2.2 Conductivité hydraulique

Les matériels et méthodes de cette partie sont exposés page 100.

Une fois les paramètres de la fonction de rétention en eau de Campbell connus, il ne manque que la valeur de la conductivité hydraulique à saturation pour paramétrer la fonction de conductivité hydraulique de Campbell. Cette propriété ne nécessite qu'une mesure de conductivité a un potentiel négatif pour pouvoir être déduite (les valeurs de h_A et b étant connues).

Estimation de la conductivité au voisinage de la saturation : infiltrométrie monopotentiel

La mesure de la conductivité hydraulique au potentiel -1 cm permet d'estimer la conductivité hydraulique à saturation. Le traitement des mesures d'infiltration destiné à calculer cette conductivité à h = -1 cm s'est révélé d'une importance capitale. Différentes méthodes sont possibles, et toutes ne donnent pas des résultats satisfaisants (dans le contexte de cette étude).

Plusieurs méthodes ont été évaluées, afin de choisir celle qui donne les résultats (apparemment) les plus fiables. Deux méthodes 'graphiques' ont été testées, la méthode de White et Sully (1987) et la méthode de Haverkamp *et al.* (1994). Ces dernières ne donnant pas une totale satisfaction, des méthodes d'ajustement direct des paramètres de l'infiltration sur les courbes mesurées ont été testées, avec le souci de trouver des 'fonctions d'erreur' permettant d'obtenir un résultat cohérent.

Au vu des difficultés à choisir la méthode de calcul, **un jeu de données d'infiltrations réalisées sur la parcelle d'étude du programme ESHEL** (Millot, 2004) **a été traité en parallèle**. Cela permet d'avoir une base de comparaison avec un jeu de données acquis indépendamment du premier (à l'échelle du secteur agricole), mais dans un **contexte pédologique identique**.

Les tableaux de résultats de chacune de ces méthodes donnent les renseignements permettant de les comparer. Les valeurs minimales, médianes et maximales de la conductivité hydraulique et de la sorptivité à – 1 cm sont présentées (le minimum et le maximum étant plus appropriés pour détecter des paramètres anormalement bas). La proportion de résultats des calculs (parmi les 130 infiltrations traitées) ayant permis d'obtenir des valeurs de S et de K (1) positives et (2) qui respectent le temps de stabilisation ou le temps gravitaire permet ensuite de s'assurer que les estimations respectent ces quelques critères de base. Enfin les calculs d'erreur d'ajustement sont présentés.

□ Calculs par la méthode de White et Sully (1987)

La méthode de White et Sully (1987) présente certaines limitations physiques connues, mais c'est une méthode simple à appliquer qui donne des résultats assez fiables (notamment parce qu'elle se base en partie sur le flux en régime permanent), bien qu'un peu biaisés.

Résultats :

Le tableau 33 synthétise le résultat des calculs effectués à l'échelle du secteur agricole :

Secteur agricole	[i;i+1]			[i-1;i+1]		
	min	méd.	max	min	méd.	max
S [mm.s ^{-1/2}]	6,2.10 ⁻²	4,0.10 ⁻¹	1,1.10 ⁺⁰	8,1.10 ⁻²	3,6.10 ⁻¹	1,1.10 ⁺⁰
K [mm.s ⁻¹]	1,4.10 ⁻³	9,1.10 ⁻³	7,8.10 ⁻²	6,0.10 ⁻⁶	8,4.10 ⁻³	7,0.10 ⁻²
%Succès (sans T _{STAB})	-	58 %	-	-	58 %	-
%Succès (avec T _{STAB})	-	42 %	_	-	49 %	_
RRSEP% _{RT}	_	28 %	_	_	25 %	-

tableau 33 – Paramètres statistiques de S et K calculés avec la méthode de White et Sully (1987), pour le secteur agricole.

Les calculs ont été réalisés sur [i ; i+1] ou [i-1 ; i+1] ; S est la sorptivité capillaire ; K est la conductivité hydraulique non-saturée ; **%Succès** (sans T_{STAB}) est le pourcentage d'infiltrations pour lesquelles S et K sont positifs (>0) ; **%Succès** (avec T_{STAB}) est le pourcentage d'infiltrations pour lesquelles S et K sont positifs (>0) et l'intervalle de temps du régime transitoire est inférieur au temps de stabilisation estimé avec S et K ; RRSEP%_{RT} est la racine de l'erreur relative quadratique (RRSEP, exprimée en %) du régime transitoire. La RRSEP% du régime permanent n'est pas calculée car il n'existe pas d'équations de White et Sully pour le régime permanent.

Le tableau 34 synthétise le résultat des calculs effectués à l'échelle de la parcelle d'étude :

Parcelle d'étude	[i;i+1]			[i-1;i+1]		
	min	méd.	max	min	méd.	max
S [mm.s ^{-1/2}]	5,2.10 ⁻²	3,5.10 ⁻¹	$1,0.10^{+0}$	4,2.10 ⁻²	3,5.10 ⁻¹	$1,1.10^{+0}$
K [mm.s ⁻¹]	2,0.10 ⁻⁴	1,1.10 ⁻²	8,5.10 ⁻²	7,8.10 ⁻⁴	9,2.10 ⁻³	6,0.10 ⁻²
%Succès (sans T _{STAB})	-	70 %	-	_	74 %	-
%Succès (avec T _{STAB})	_	66 %	_	_	74 %	_
RRSEP% _{RT}	-	23 %	-	_	25 %	_

tableau 34 – Paramètres statistiques de S et K calculés avec la méthode de White et Sully (1987), pour la parcelle (Millot, 2004).

Il faut signaler que, quel que soit l'intervalle de temps choisi pour le régime transitoire, la méthode de White et Sully (modifiée) permet toujours d'obtenir des valeurs de S supérieures à 0, du fait de la méthode de détermination de S. Ce n'est pas le cas des autres approches testées.

Le calcul du temps d'effet du sable sur l'intervalle [i-1;i+1] semble donner des résultats un peu meilleurs que sur l'intervalle [i;i+1] (cohérence du temps de calcul avec T_{STAB} notamment), mais la différence est peu marquée.

La gamme de variation de S et de K est très proche entre la parcelle et le secteur agricole, avec des valeurs médianes très proches. Les valeurs de sorptivité minimales sont basses, mais pas excessives.

A l'échelle du secteur agricole, moins de 50 % des calculs d'infiltrations aboutissent à des temps de stabilisation ou gravitaires cohérents avec l'intervalle de temps des calculs du régime transitoire. A l'échelle du secteur agricole, cette valeur passe à 75 %, ce qui est beaucoup mieux mais encore insatisfaisant. Cela signifie qu'au moins 25 % des infiltrations ont des valeurs de S et ou de K 'incohérentes', ou en tout cas moins sûres.

Il faut rappeler que ces résultats prennent en compte, pour chaque infiltration, le meilleur résultat parmi tous les intervalles de temps de calcul du régime transitoire possible. Il n'y a donc pas d'imprécision liée au mauvais choix d'un opérateur ici.





Les variations d'infiltration cumulées et de temps sont sur [i-1; i+1]; la valeur de la sorptivité (ligne horizontale en pointillés) ainsi déterminée est de 0,11 mm.s^{-1/2}. Les deux lignes verticales en tirets correspondent la séparation entre le temps d'effet du sable et le régime transitoire d'une part, et entre le régime transitoire et le régime (quasi)permanent d'autre part.





La valeur du flux q_{RP} déterminée est de 0,005 mm.s⁻¹. Avec la valeur de S estimée, la valeur de K calculée est de 0,004 mm.s⁻¹. Avec un temps de régime transitoire de 1125 s et un temps de stabilisation estimé à 1151 s, la contrainte de temps est respectée sur cet exemple.

Sur la figure 55 ci-dessus, le 2^e point de mesure a été choisi comme la borne supérieure d'effet du sable. Or, la 7^e mesure est la valeur minimale sur d.I/d. \sqrt{t} . Ce choix de l'algorithme est dû au fait que la pente de la courbe n'est globalement pas décroissante sur l'intervalle de mesure 1 à 7. Il s'agit en fait d'une imprécision de la

mesure au point 7 ou d'un 'ralentissement' momentané de l'infiltration à ce moment, qui engendre une valeur anormale de $d.I/d.\sqrt{t}$ pour les mesures proches de ce point.

Pour la figure 56 ci-dessus, l'équation de White et Sully (1987), paramétrée avec la valeur de S estimée précédemment en d.I/d. $\sqrt{t} = f(\sqrt{t_{géom}})$ ne s'ajuste pas bien à la courbe d'infiltration. Cela est du au fait que la méthode ne prend pas en compte la capillarité (sorptivité) latérale, et n'intègre pas explicitement les effets du sable de contact.





Les variations d'infiltration cumulées et de temps sont sur [i-1; i+1]; La valeur de la sorptivité ainsi déterminée est de 0,40 mm.s^{-1/2}.

Le temps d'effet du sable est plus visible sur l'exemple de la figure 57, même si les mesures sont assez 'bruitées'. Le minimum sur $d.I/d.\sqrt{t}$ n'est, cette fois encore, pas un critère suffisant pour déterminer le temps d'effet du sable. Les mesures 15 et 36, qui sont des artéfacts liés aux imprécisions, ont des valeurs très basses de $d.I/d.\sqrt{t}$.



figure 58 – Exemple de résultat (2) de la détermination de q_{RP} par la méthode de White et Sully et de l'ajustement de la courbe d'infiltration $I = S.\sqrt{t}$ avec la valeur de S déterminée précédemment.

La valeur du flux q_{RP} déterminée est de 0,0009 mm.s⁻¹. Avec la valeur de S estimée, la valeur de K calculée est de 0,012 mm.s⁻¹. Avec un temps de régime transitoire de 1260 s et un temps de stabilisation estimé à 1271 s, la contrainte de temps est quasiment respectée sur cet exemple.

On retrouve sur cet exemple le décalage décrit ci-dessus (figure 56), mais plus accentué. Le décalage plus fort au début de la courbe, sur le régime transitoire, pourrait s'expliquer par la non prise en compte du sable de contact (dont l'influence

serait plus marquée dans ce cas-ci).

□ Calculs par la méthode de Haverkamp et al. (1994)

Les équations de Haverkamp *et al.* (1994) sont *a priori* plus exactes que celles de White et Sully (1987) qui ne prennent pas en compte la capillarité latérale. Cependant, la méthode graphique s'avère sensible aux imprécisions de la mesure, qui paraissent faibles sur les graphiques I = f(t) mais qui sont grandement amplifiées sur les graphiques d.I/d. $\sqrt{t} = f(\sqrt{t_{géom}})$.

Les équations de Haverkamp *et al.* (1994) ont été utilisées dans un premier temps pour des ajustements graphiques, puis pour des ajustements directs.

Ajustement par la méthode graphique de régression linéaire

Résultats

Le tableau 35 synthétise le résultat des calculs effectués à l'échelle du secteur agricole :

Secteur agricole	[i;i+1]			[i-1;i+1]		
	min	méd.	max	min	méd.	max
S [mm.s ^{-1/2}]	8,3.10 ⁻⁵	1,1.10 ⁻¹	6,1.10 ⁻¹	3,4.10 ⁻⁴	1,0.10 ⁻¹	5,9.10 ⁻¹
K [mm.s ⁻¹]	2,0.10 ⁻⁵	2,6.10 ⁻²	1,6.10 ⁻¹	2,5.10 ⁻⁴	2,4.10 ⁻²	1,5.10 ⁻¹
%Succès (sans T _{STAB})	-	90 %	-	-	93 %	-
%Succès (avec T _{STAB})	-	44 %	_	_	44 %	—
RRSEP% _{RT}	_	16 %	-	_	17 %	-
RRSEP% _{RP}	_	38 %	-	_	42 %	-

tableau 35 – Paramètres statistiques de S et K calculés avec la méthode de Haverkamp *et al.* (1994), avec un ajustement graphique par régression linéaire, pour le secteur agricole.

Parcelle d'étude	[i;i+1]			[i-1;i+1]		
	min	méd.	max	min	méd.	max
S [mm.s ^{-1/2}]	9,3.10 ⁻⁵	1,6.10 ⁻¹	5,5.10 ⁻¹	9,4.10 ⁻⁴	1,1.10 ⁻¹	6,2.10 ⁻¹
K [mm.s ⁻¹]	4,7.10 ⁻⁴	1,6.10 ⁻²	1,4.10 ⁻¹	8,3.10 ⁻⁵	1,8.10 ⁻²	1,4.10 ⁻¹
%Succès (sans T _{STAB})	_	98 %	_	_	98 %	_
%Succès (avec T _{STAB})	-	53 %	—	-	58 %	—
RRSEP% _{RT}	_	15 %	_	-	24 %	_
RRSEP% _{RP}	_	15 %	_	_	19 %	_

Le tableau 36 synthétise le résultat des calculs effectués à l'échelle de la parcelle d'étude :

tableau 36 – Paramètres statistiques de S et K calculés avec la méthode de Haverkamp *et al.* (1994), avec un ajustement graphique par régression linéaire, pour la parcelle d'étude.

Comme pour la méthode de White et Sully (1987), l'intervalle [i-1; i+1] semble le plus pertinent pour calculer les variations d'infiltration et de temps, mais sans

différence nette.

Exemples graphiques

On constate que par rapport à la méthode de White et Sully (1987), la gamme de conductivités hydrauliques estimées est plus restreinte. Par contre les valeurs minimales de sorptivité sont beaucoup plus basses, ce qui semble confirmer le fait que la méthode de White et Sully surestime cette dernière.

Le pourcentage de calculs permettant d'obtenir un calcul de S et de K basé sur un intervalle de temps cohérent (inférieur) avec le temps de stabilisation estimé est plus faible qu'avec la méthode de White et Sully (1987) (44 % contre 49 % sur le secteur agricole ; 58 % contre 74 % sur la parcelle d'étude). Si l'on ne prend pas en compte la cohérence du temps de stabilisation, le rapport s'inverse (93 % contre 58 % sur le secteur agricole ; 98 % contre 74 % sur la parcelle d'étude).

Tandis que la RRSEP% du régime permanent est plus élevée que celle du régime transitoire pour les infiltrations à l'échelle du secteur agricole, elles sont comparables pour les mesures sur la parcelle d'étude (alors même que le calcul ne tient compte que du régime transitoire).

Il apparaît aussi que, en moyenne, pour une infiltration donnée, seuls 35 % des intervalles de temps testés pour le régime transitoire permettent d'obtenir une valeur de S positive pour les infiltrations mesurées sur le secteur agricole. Ce chiffre passe à 65 % pour la parcelle d'étude. Cela montre que les conditions d'applications de la méthode d'Haverkamp et al. (1994) sont limites pour le secteur agricole, et un peu meilleures pour la parcelle d'étude, et/ou que les mesures sont probablement de meilleure qualité sur la parcelle (effet possible des erreurs de mesure).



Ajustement linéaire, Haverkamp (Site 20003, p2)

figure 59 – Exemple de résultat (1) de la détermination de S et K par la méthode de Haverkamp *et al.* (1994), avec une détermination graphique en d.I/d. $\sqrt{t} = f(\sqrt{t_{géom}})$.

La valeur de S estimée est de 0,09 mm.s^{-1/2}. Avec la valeur de C2 estimée sur ce graphique, la valeur de K calculée est de 0,004 mm.s⁻¹. Les deux lignes verticales en tirets correspondent la séparation entre le temps d'effet du sable et le régime transitoire d'une part, et entre le régime transitoire et le régime (quasi)permanent d'autre part.

Le graphique de la figure 59 montre clairement la difficulté d'un ajustement avec la méthode linéaire proposée par Haverkamp et al. (1994) : les valeurs de d.I/d.vt sont très 'bruitées', du fait des erreurs, des imprécisions de lecture et des effets du vent sur l'infiltromètre. Il est donc difficile à l'opérateur de 'choisir' un intervalle de temps pour le régime transitoire, choix qui aura une influence déterminante sur la valeur de S. On voit que, en prenant un intervalle de temps plus court (e.g. 3 à 12) ou plus long (e.g. 3 à 22), les valeurs de S estimées risquent fort d'être négatives, ce qui est aberrant d'un point de vue physique.

Seule une mesure automatisée (sur le terrain), permettant des mesures à un intervalle de temps plus court (notamment au début de la courbe), permettrait éventuellement de remédier à ce problème.





Sur l'exemple de la figure 60, comme sur la majorité des 130 mesures d'infiltration traitées, on constate que les valeurs de d.I/d. \sqrt{t} sont très perturbées sur f($\sqrt{t_{géom}}$), ce qui est problématique.



figure 61 – Exemple de résultat (1) de l'ajustement des équations de Haverkamp *et al.* (1994) du régime transitoire et du régime permanent, sur I=f(t), après détermination graphique de S et K sur le régime transitoire.

Avec un temps de régime transitoire de 435 s et un temps de stabilisation estimé à 1156 s, la contrainte de temps est respectée sur cet exemple. La courbe d'ajustement sur le régime permanent est tracée sur ce graphique, mais l'équation spécifique décrivant l'infiltration sur cet intervalle n'est pas utilisée pour déterminer S et K dans le cas de la méthode par ajustement linéaire.

La figure 61 présente un ajustement des fonctions de Haverkamp *et al.* (1994) relativement correct, ce qui n'est pas toujours le cas. Le léger écart entre les mesures réelles et l'infiltration estimée sur le régime permanent est parfaitement acceptable, car la détermination de S et K est réalisée sur le régime transitoire.



Ajustement linéaire, Haverkamp (Site 20035, p1)



Avec un temps de régime transitoire de 1560 s et un temps de stabilisation estimé à 1879 s, la contrainte de temps est respectée sur cet exemple.

La figure 62 présente un cas un peu moins favorable que pour l'infiltration réalisée sur l'horizon travaillé du site 20 003. Le décalage entre l'infiltration réelle et l'infiltration prédite avec les valeurs de K et de S estimées précédemment s'explique par un effet du sable plus conséquent que sur l'exemple précédent (et donc un volume d'eau plus important infiltré dans ce dernier). L'effet du sable ne peut cependant pas être intégré pour les courbes ajustées sur I=f(t), bien que Roulier (1999) ait présenté un jeu d'équation intégrant explicitement l'effet du sable. Il n'est pas possible de déterminer <u>après coup</u> le temps d'effet du sable et le volume d'eau qui s'y est infiltré. L'ajustement sur le régime permanent est très mauvais (courbe hors des limites du graphique). On peut interpréter ce décalage comme une des limites de la détermination de S et K basée uniquement sur le régime transitoire.

L'ajustement du régime permanent serait peut être un peu meilleur si l'équation du régime transitoire était utilisée jusqu'au temps de stabilisation (déterminé avec S et K), avant d'être être relayée par l'équation du régime permanent (au lieu d'arrêter arbitrairement le régime transitoire sur la dernière mesure ayant servi au calcul).

Ajustement simultané sur le régime transitoire, le régime quasi-permanent et l''écart au temps de stabilisation'

Au lieu d'effectuer un ajustement linéaire sur le graphique d.I/d. $\sqrt{t} = f(\sqrt{t_{géom}})$, il est envisageable d'ajuster les équations de Haverkamp *et al.* (1994) directement sur les données I = f(t) (c'est à dire trouver les valeurs de S et de K en cherchant à **minimiser** l'erreur d'ajustement des équations sur I = f(t)).

En apparence séduisantes, les méthodes d'ajustement direct n'en ont pas moins des limitations parfois critiques dont il a fallu tenir compte pour obtenir des résultats satisfaisants.

C'est le choix de la méthode de calcul de l'erreur d'ajustement des équations sur les données réelles qui s'est avéré le plus critique. Dans un premier temps sont exposés les résultats où l'erreur d'ajustement est une pondération de l'erreur sur le régime transitoire, le régime permanent et l'écart au temps de stabilisation. Les « valeurs de départ » de la fonction d'optimisation sont $S = 4 \text{ mm.s}^{-1/2}$ et $K = 100 \text{ mm.s}^{-1}$ (paramètres valables pour tous les ajustements directs, quelle que soit la fonction d'erreur). Ce choix est justifié en pratique par une tendance de la méthode d'optimisation à attribuer

des valeurs négatives à S et K. Le choix de valeurs initiales élevées permet donc de s'assurer que l'algorithme ne passe pas trop vite à des valeurs négatives.

Résultats

Le tableau 37 synthétise le résultat des calculs effectués à l'échelle du secteur agricole :

Secteur agricole	[i;i+1]			[i-1;i+1]		
	min	méd.	max	min	méd.	max
S [mm.s ^{-1/2}]	9,4.10 ⁻³	2,3.10 ⁻¹	7,4.10 ⁻¹	9,4.10 ⁻³	2,2.10 ⁻¹	7,4.10 ⁻¹
K [mm.s ⁻¹]	3,0.10 ⁻⁵	1,0.10 ⁻²	6,5.10 ⁻²	3,0.10 ⁻⁵	1,2.10 ⁻²	6,5.10 ⁻²
%Succès (sans T _{STAB})	_	98 %	-	-	99 %	—
%Succès (avec T _{STAB})	_	78 %	-	-	81 %	—
RRSEP% _{RT}	_	10 %	-	-	11 %	_
RRSEP% _{RP}	_	9 %	_	_	10 %	_

tableau 37 – Paramètres statistiques de S et K calculés avec la méthode de Haverkamp *et al.* (1994), avec un ajustement direct et une fonction d'erreur basée sur les régimes transitoire et permanent, ainsi que l'écart au temps de stabilisation, (secteur agricole; fonction d'erreur %RRSEP_{globale}).

Le tableau 38 synthétise le résultat des calculs effectués à l'échelle de la parcelle d'étude :

Parcelle d'étude	[i;i+1]			[i-1;i+1]		
	min	méd.	max	min	méd.	max
S [mm.s ^{-1/2}]	2,8.10 ⁻²	2,5.10 ⁻¹	7,3.10 ⁻¹	3,2.10 ⁻²	2,5.10 ⁻¹	7,3.10 ⁻¹
K [mm.s ⁻¹]	7,5.10 ⁻⁴	1,5.10 ⁻²	6,2.10 ⁻²	1,0.10 ⁻³	1,5.10 ⁻²	6,2.10 ⁻²
%Succès (sans T _{STAB})	_	84 %	_	_	86 %	_
%Succès (avec T _{STAB})	-	74 %	-	-	81 %	-
RRSEP% _{RT}	-	17 %	-	-	18 %	—
RRSEP% _{RP}	_	14 %	_	_	14 %	_

tableau 38 – Paramètres statistiques de S et K calculés avec la méthode de Haverkamp *et al.* (1994), avec un ajustement direct et une fonction d'erreur basée sur les régimes transitoire et permanent, ainsi que l'écart au temps de stabilisation, (parcelle d'étude ; fonction d'erreur %RRSEP_{globale}).

La différence la plus marquante avec la méthode d'ajustement graphique linéaire de Haverkamp *et al.* (1994) est le pourcentage de calculs permettant d'obtenir des valeurs de S, de K, et de temps de stabilisation 'réalistes' (81 % contre 44 %).

Comme dans le cas de l'ajustement graphique, la méthode a tendance à avoir certaines valeurs de sorptivité très basses.

Comme dans le cas de l'ajustement graphique, pour une infiltration donnée, il y a toujours aussi peu d'intervalles de temps testés qui permettent d'obtenir une estimation de S supérieure à 0 (29 % des intervalles sur le secteur agricole et 37 % sur la parcelle d'étude ; résultats moyens, non présentés dans les tableaux). Les raisons de cette absence de différence de 'taux de succès des intervalles de calcul possibles' peuvent

s'expliquer par le fait que l'ajustement direct n'utilise pas (dans ce cas) de contraintes de valeurs pour S et K : l'algorithme d'optimisation peut tester, et éventuellement choisir, des valeurs de S ou de K négatives ou nulles.

Exemples graphiques



figure 63 – Exemple de résultat (1) de l'ajustement des équations de Haverkamp *et al.* (1994) du régime transitoire et du régime permanent, sur I=f(t), après détermination directe de S et K sur les régimes transitoire et permanent.

La valeur de S estimée est de 0,11 mm.s^{-1/2}, celle de K de 0,004 mm.s⁻¹. Avec un temps de régime transitoire de 1095 s et un temps de stabilisation estimé à 1102 s, la contrainte de temps est respectée sur cet exemple.



temps [s] Ajustement direct, Haverkamp (Site 20035, p1)



La valeur de S estimée est de 0,28 mm.s^{-1/2}, celle de K de 0,0086 mm.s⁻¹. Avec un temps de régime transitoire de 900 s et un temps de stabilisation estimé à 902 s, la contrainte de temps est respectée sur cet exemple.

Sur l'exemple de la figure 63, l'ajustement sur les régimes transitoire et permanent est correct. De même, la jointure entre le régime transitoire et le régime permanent est assez bonne. Pour d'autres infiltrations, il arrive fréquemment qu'un biais plus net apparaisse sur le régime transitoire et/ou le régime permanent, et/ou que la jointure J. Moeys | Partie IV

entre les deux régimes soit beaucoup moins bonne. Ces biais et décalages respectent malgré tout généralement la 'tendance' de la courbe. Ils sont dus au fait que l'optimisation tient compte de l'écart au temps de stabilisation'. Cela peut amener l'algorithme à choisir des solutions pour K et S moins fidèles aux mesures d'infiltration, mais plus cohérentes l'une par rapport à l'autre, et relativement au temps de stabilisation.

Sur l'exemple de la figure 64, comme sur le précédent, on constate que l'ajustement est correct dans sa tendance, mais qu'il existe toujours un décalage constant sur le régime transitoire, lié à la sorptivité du sable de contact.

- Ajustement simultané sur le régime transitoire et le régime quasi-permanent

La méthode d'optimisation mise au point (*Script R*) permet de faire varier les pondérations des 3 sous-parties de la fonction d'erreur globale (régime transitoire, régime permanent, écart au temps de stabilisation). Il est ainsi possible de ne pas tenir compte d'un des 3 critères (pondération fixée à zéro). Des ajustements directs ont été testés avec **un calcul d'erreur ne tenant pas compte de l'écart au temps de stabilisation**, afin d'évaluer indirectement son importance.

[i-1,i+1]	secteur agricole			parcelle d'étude		
	min	méd.	max	min	méd.	max
S [mm.s ^{-1/2}]	1,8.10 ⁻²	2,6 .10 ⁻¹	7,1.10 ⁻¹	2,5.10 ⁻²	2,2 .10 ⁻¹	6,3.10 ⁻¹
K [mm.s ⁻¹]	7,5.10 ⁻⁴	9,1 .10 ⁻³	5,2.10 ⁻²	1,1.10 ⁻³	1,1 .10 ⁻²	5,7.10 ⁻²
%Succès (sans T _{STAB})	-	97 %	-	-	74 %	_
%Succès (avec T _{STAB})	-	61 %	—	-	49 %	—
RRSEP% _{RT}	-	7 %	-	-	8 %	-
RRSEP% _{RP}	-	3 %	—	-	3 %	—

tableau 39 – Paramètres statistiques de S et K calculés avec la méthode de Haverkamp *et al.* (1994), avec un ajustement direct et une fonction d'erreur basée sur les régimes transitoire et permanent (fonction d'erreur %RRSEP_{globale}).

Le tableau 39 synthétise les résultats des calculs effectués à l'échelle du secteur agricole et de la parcelle d'étude, sur l'intervalle [i-1,i+1].

La méthode d'ajustement direct simultané sur le régime transitoire et le régime permanent, sans la contrainte de l'écart au temps de stabilisation, donne des ajustements (RRSEP%) excellents (7 % sur le régime transitoire, 3 % sur le régime permanent). La gamme de valeurs des sorptivités estimées paraît aussi réaliste, les valeurs restant au-dessus de $0.01 \text{ mm.s}^{-1/2}$.

Cependant, pour 40 à 50 % des valeurs de S et de K estimées, l'intervalle de temps sur lequel est effectué le calcul du régime transitoire est supérieur au temps de stabilisation.

– Test de la fonction d'erreur globale 'alternative'

Deux approches entrent en concurrence pour le calcul de l'erreur globale. On peut alternativement (i) calculer séparément l'erreur sur le régime transitoire et le régime permanent, *puis* calculer une moyenne pondérée des deux (ii) calculer une erreur point par point, simultanément sur le régime transitoire et le régime permanent, puis en faire une moyenne globale. Si, dans le premier cas, le nombre de points utilisés pour le calcul du régime transitoire et du régime permanent n'affecte pas la pondération, dans le second (sans pondération explicite) l'un ou l'autre des régimes est privilégié en fonction de l'effectif de points qu'il comprend. Cette approche paraît *a priori* équilibrée.

Le tableau 40 synthétise le résultat des calculs effectués à l'échelle du secteur agricole et de la parcelle d'étude, sur l'intervalle [i-1,i+1]:

[i-1,i+1]	secteur agricole			parcelle d'étude		
	min	méd.	max	min	méd.	max
S [mm.s ^{-1/2}]	9,2.10 ⁻³	2,1.10 ⁻¹	7,5.10 ⁻¹	5,3.10 ⁻²	2,9.10 ⁻¹	6,0.10 ⁻¹
K [mm.s ⁻¹]	3,2.10 ⁻⁵	3,1.10 ⁻³	3,8.10 ⁻²	1,0.10 ⁻³	5,2.10 ⁻³	2,6.10 ⁻²
%Succès (sans T _{STAB})	_	94 %	-	-	70 %	-
%Succès (avec T_{STAB})	-	49 %	-	-	26 %	-
RRSEP% _{RT}	-	30 %	_	-	22 %	-
RRSEP% _{RP}	_	16 %	-	_	7 %	-

tableau 40 – Paramètres statistiques de S et K calculés avec la méthode de Haverkamp *et al.* (1994), avec un ajustement direct et une fonction d'erreur basée sur les régimes transitoire et permanent (secteur agricole ; fonction d'erreur %RRSEP_{globale,alt}).

On voit que l'utilisation de la fonction d'erreur 'alternative' (qui équilibre l'importance de l'ajustement sur le régime transitoire et le régime permanent en fonction du nombre de mesures concernées) ne permet pas d'obtenir une proportion satisfaisante de mesures avec une durée du régime transitoire cohérente avec le temps de stabilisation.

Il est difficile de comparer la qualité des ajustements de cette méthode avec les autres approches car la fonction d'erreur utilisée pour optimiser l'ajustement est différente. Néanmoins, on constate que les RRSEP% obtenues sur les régimes transitoires et permanents restent acceptables.

Il est difficile de comprendre pourquoi cette méthode d'ajustement (calcul d'erreur) donne des résultats moins pertinents que la précédente, mais le fait est que les intervalles de temps de calculs du régime transitoire ne sont pas en accord avec les temps caractéristiques dérivés des valeurs de S et de K.

- Test d'un algorithme d'optimisation 'contraint' pour l'ajustement direct

On a montré ci-dessus que les résultats des ajustements directs sont fortement influencés par le calcul de l'erreur d'ajustement qui est choisi. Or, cette erreur d'ajustement est minimisée numériquement par un algorithme de calcul dédié à ce genre d'opérations. Ces algorithmes doivent idéalement combiner précision, robustesse <u>et</u> rapidité. Ces trois critères signifient aussi que les algorithmes ne garantissent pas un optimum absolu (pour les valeurs de S et de K), comme c'est le cas pour toutes les méthodes non linéaires.

La fonction 'optim' du logiciel R permet d'utiliser plusieurs algorithmes d'optimisation. Celui qui est utilisé dans les cas exposés ci-dessus est l'algorithme BFGS. La fonction 'optim' inclût aussi une variante de cet algorithme (L-BFGS-B) permettant de contraindre les valeurs des paramètres choisis (minimum et/ou maximum). Cette caractéristique est *a priori* séduisante car elle permet d'éviter les valeurs négatives, donc non réalistes de S et de K (cas de figure qui concerne quand même au minimum 1 à 15% des calculs précédents avec les méthodes par ajustements directs).

Les contraintes choisies sont : $S \ge 1.10^{-2} \text{ mm.s}^{-1/2}$ et $K \ge 1.10^{-10} \text{ mm.s}^{-1}$. Les valeurs initiales de S et K restent par contre inchangées par rapport aux ajustements directs précédents.

Le tableau 41 synthétise le résultat des calculs effectués à l'échelle du secteur agricole et de la parcelle d'étude, sur l'intervalle [i-1,i+1]:

[i-1,i+1]	secteur agricole			parcelle d'étude		
	min	méd.	max	min	méd.	max
S [mm.s-1/2]	1,0.10 ⁻⁰²	1,0.10 ⁻⁰²	5,4.10 ⁻⁰¹	1,0.10 ⁻⁰²	1,0.10 ⁻⁰²	4,3.10 ⁻⁰¹
K [mm.s-1]	1,0.10 ⁻¹⁰	1,0.10 ⁻¹⁰	5,2.10 ⁻⁰²	1,0.10 ⁻¹⁰	1,0.10 ⁻¹⁰	3,5.10 ⁻⁰²
%Succès (sans T _{STAB})	-	100 %	-	-	100%	_
%Succès (avec T_{STAB})	_	99 %	—	-	98%	—
RRSEP% _{RT}	-	95 %	—	-	97%	—
RRSEP% _{RP}	_	1.10 ⁺⁶ %	_	_	2.10 ⁺⁶ %	_

tableau 41 – Paramètres statistiques de S et K calculés avec la méthode de Haverkamp *et al.* (1994), avec un ajustement direct et une fonction d'erreur basée sur les régimes transitoire et permanent (fonction d'erreur %RRSEP_{globale}).

Ce cas de figure reflète à lui seul les difficultés de l'ajustement direct :

- Le temps de calcul du régime transitoire est quasiment tout le temps respecté, mais...
- On constate que la conductivité hydraulique estimée est extrêmement faible. Sa valeur médiane de 1.10⁻¹⁰ correspond en fait à la valeur minimale imposée pour K.
- On constate que la sorptivité estimée est, elle aussi, faible. Sa valeur médiane de 1.10⁻² correspond en fait à la valeur minimale imposée pour S.
- Malgré ces valeurs de S et de K aberrantes, l'intervalle de temps sur lequel est réalisé le calcul du régime transitoire est presque toujours compatible avec le temps de stabilisation ou de gravité estimé. Cela montre les limites de ces critères d'évaluation.

Il est très probable qu'un meilleur paramétrage de la fonction d'optimisation (seuils de convergences...), ainsi qu'un ajustement uniquement sur le régime transitoire, permettrait d'obtenir des valeurs plus réalistes pour S. D'autres essais, non détaillés ici, ont montré qu'une optimisation contrainte aboutit quasiment systématiquement à des valeurs de K très faibles. Il semblerait que l'algorithme tende à fixer K au minimum et n'ajuste effectivement que la valeur de S.

Cela montre qu'un ajustement direct avec une optimisation contrainte tend à faire échouer la procédure d'optimisation (avec les réglages utilisés de la fonction d'optimisation – peut-être d'autres réglages donneraient un meilleur résultat ?), ou que l'ajustement direct sans contrainte sur l'écart au temps de stabilisation n'est pas sensible aux valeurs de K.

Analyse a posteriori des fonctions d'erreur

Pour mieux comprendre les différences obtenues entre les méthodes de calcul de S et $K_{-1 \text{ cm}}$ par ajustement direct il peut être intéressant de **visualiser** la qualité de l'ajustement (RRSEP%) en fonction des **valeurs possibles** de S et de K. Il s'agit de calculer la valeur de la RRSEP% sur une grille de couples de valeurs possibles de S et de K, afin de la représenter sous forme de courbes isovaleurs sur un graphique avec S en abscisse de K en ordonnées.

Un tel graphique, permet de visualiser la 'topographie' de l'erreur dans l'espace des valeurs de S et K, et ainsi de mieux se rendre comprendre compte de l'existence ou non d'un optimum unique, ou à défaut d'optimums locaux. Dans le deuxième cas, il y a non-unicité de la solution optimale, ce qui pose un problème méthodologique.



figure 65 – Isovaleurs de la RRSEP $\%_{RT}$ (régime transitoire) en fonction des valeurs de S et de K.

Les axes des abscisses (S) et des ordonnées (K) sont en échelles logarithmiques. Les points figurés sur le graphique représentent les couples de valeurs de S–K obtenus pour ces infiltrations par les méthodes de Haverkamp linéaire (HL), Haverkamp direct (HD ; contraint sur le régime transitoire, le régime permanent et l'écart au temps de stabilisation) et White et Sully (WS). Les calculs ont été effectués sur le régime transitoire tel que déterminé par la méthode de Haverkamp directe, soit les mesures 3 à 22 pour le site 20 003–P2 et les mesures 11 à 25 pour le site 20 035–P1. Les mesures déterminées comme appartenant au régime transitoire varient d'une méthode à l'autre, les isolignes d'erreur en fonction de S et K sont donc en réalité différentes pour les méthodes HS et WS. Les calculs ont été effectués sur 200 valeurs de S et 200 valeurs de K. Les isolignes représentées sont 10, 25, 50, 100, 250, 500, 1000 %. Les valeurs initiales de l'optimisation, S = 4 mm.s^{-1/2} et K = 100 mm.s⁻¹ sont hors graphique.

Il est à noter que le résultat de la fonction RRSEP% = f(S,K) change selon l'intervalle de mesures choisies pour le régime transitoire. Il est donc difficile de comparer <u>les résultats</u> des méthodes puisque, pour une même infiltration, elles ne se basent pas forcément sur le même intervalle de mesures pour le régime transitoire.

Les algorithmes utilisés pour les ajustements directs sont conçus pour converger rapidement vers une solution 'optimale'. Ils n'utilisent donc pas une représentation complète de la fonction RRSEP% = f(S;K) comme celle que de la figure 65. La visualisation de cette fonction permet de comprendre *a posteriori* pourquoi l'algorithme converge vers une solution optimale et le cas échéant pourquoi il échoue.

Dans les deux exemples présentés sur la figure 65, on constate que la fonction

d'erreur RRSEP%_{RT} ne semble pas présenter³⁶ un optimum unique, mais plutôt une plage de valeurs de S et de K permettant un ajustement minimisant la RRSEP%_{RT}. Ce constat confirme visuellement les problèmes constatés pour les ajustements directs des fonctions de Haverkamp *et al.* (1994) basées uniquement sur le régime transitoire.



figure 66 – Isovaleurs de la RRSEP%_{RT,RP} (moyenne du régime transitoire et du régime permanent) en fonction des valeurs de S et de K. Les isolignes représentées sont 10, 25, 50, 100, 250, 500, 1000 %.

La figure 66 montre que le calcul d'une RRSEP%_{RT,RP} met en évidence une gamme de S et de K minimisant la RRSEP%_{RT,RP} beaucoup plus restreinte que dans le cas précédent. Des essais ont cependant montré que les calculs de S et de K par ajustement direct avec une minimisation de la RRSEP%_{RT,RP} donne des résultats satisfaisants pour la RRSEP%_{RT,RP}, mais avec un temps du régime transitoire apparemment <u>incohérent</u> avec la valeur de T_{STAB} calculée avec les valeurs de S et K estimées.



figure 67 – Isovaleurs de la RRSEP% globale (moyenne du régime transitoire, du régime permanent et de l'écart à un temps de stabilisation) en fonction des valeurs de S et de K. Les isolignes représentées sont 10, 25, 50, 100, 250, 500, 1000 %.

³⁶ La topographie locale des isovaleurs de la RRSEP% dépend aussi de la résolution de la grille [S,K] sur laquelle sont effectués les calculs
La figure 67, présente les isovaleurs de la RRSEP% globale, c'est à dire d'une agglomération des erreurs sur le régime transitoire, le régime permanent et l'écart au temps de stabilisation. À l'inverse de ce qui est constaté sur la figure 65, on constate l'existence d'un optimum local pour S et K permettant de minimiser la RRSEP% globale. Il s'agit d'une confirmation visuelle de la plus grande robustesse de la méthode.

Les deux exemples présentés ci-dessus ne représentent pas de valeurs négatives de S et de K. Or les méthodes d'ajustement direct utilisées sont, sauf exception, non contraintes à des valeurs positives de S et de K. Il faudrait en toute rigueur examiner la surface de réponse de la RRSEP% avec des valeurs négatives de S et K, mais la visualisation / représentation graphique logarithmique doit alors être découpée en plusieurs domaines.

Conclusion : méthode de calcul retenue pour les tests statistiques

La figure 68 et la figure 69 présentent les graphiques 'box & whisker' de la sorptivité et de la conductivité hydraulique (respectivement) pour les différentes modalités de calcul, pour le secteur d'étude et pour la parcelle.



figure 68 – Graphique 'box & whisker' des sorptivités, en fonction des différentes méthodes de calcul (intervalle [i-1,i+1]).

L'axe des abscisses est en échelle logarithmique, ce qui atténue un peu la distorsion des valeurs de S vers les valeurs faibles.

Les différences entre méthodes de calcul semblent plus importantes qu'entre les valeurs obtenues sur tout le secteur agricole et la parcelle. Plus que les différences entre les valeurs médianes observées d'une méthode à l'autre, c'est l'étalement des valeurs (quantiles) qui change le plus.

J. Moeys | Partie IV



Conductivité K [mm.s⁻¹]

figure 69 – Graphique 'box & whisker' des conductivités hydrauliques, en fonction des différentes méthodes de calcul (intervalle [i-1,i+1]).

L'axe des abscisses est en échelle logarithmique, ce qui atténue un peu la distorsion des valeurs de K vers les valeurs faibles.

La figure 70 présente les gammes de valeurs des écarts au temps de stabilisation, quand le calcul a permis d'aboutir à des valeurs de S et K positives. Avec la méthode de White et Sully (1987) cet écart est quasiment tout le temps positif et inférieur à 3 minutes (voir inférieur à 30 s pour la parcelle), ce qui montre que la méthode permet des valeurs de S, K et T_{STAB} cohérentes avec l'intervalle de temps utilisé pour le calcul du régime transitoire. Avec la méthode d'ajustement linéaire de la fonction de Haverkamp *et al.* (1994), une proportion importante des temps de calcul du régime transitoire (> 50 % sur le secteur agricole) est supérieure au temps de stabilisation estimé (écart négatif). Avec la méthode d'ajustement direct non-linéaire des équations de Haverkamp *et al.* (1994), seuls 25 % des valeurs sont inférieures au temps de stabilisation inférieur à -30 s.

La méthode qui a été retenue pour les traitements statistiques est l'ajustement direct avec une optimisation simultanée sur le régime transitoire, le régime permanent et l'écart au temps de stabilisation.

Ce choix ne correspond pas réellement à un 'optimum', mais c'est le seul qui permette à la fois de tenir compte des 3 composantes de l'infiltration (contrairement à la méthode White et Sully, qui néglige la capillarité latérale) et d'obtenir des valeurs de S et de K qui paraissent réalistes (> 0) et cohérentes (respect des temps caractéristiques).



figure 70 – Graphique 'box & whisker' des écarts au temps de stabilisation, en fonction des différentes méthodes de calcul (intervalle [i-1,i+1]).

L'axe des abscisses est en échelle logarithmique double (intervalle 30 s), centrée sur le zéro ; T_{STAB} est le temps de stabilisation ; Δt_{RT} est la durée écoulée entre le début de l'infiltration et la dernière considérée comme appartenant au régime transitoire. Ce graphique ne représente les écarts au temps de stabilisation que pour les calculs ayant permis d'aboutir à une valeur de S et de K positives, et ne tient pas compte du temps gravitaire, ce qui explique la différence entre les statistiques présentées ci-dessus et les '% succès (avec T_{STAB})' des tableaux présentés plus haut. NB : les écarts peuvent être positifs ou négatifs, suivant que le temps de stabilisation déterminé avec S et K est supérieur ou inférieur au temps de transition 'régime transitoire - régime permanent' choisi pour les calculs.

Paramètres de la fonction de conductivité hydraulique de Campbell

Les paragraphes ci-dessus ont exposé les résultats du calcul de la conductivité hydraulique au potentiel – 1 cm à l'aide d'un infiltromètre à disque. Cependant, c'est la conductivité hydraulique à saturation K_s qui est le paramètre caractéristique des fonctions de conductivité de Campbell. Les valeurs de cette dernière, déduites à partir des paramètres h_A , b et $K_{(h=-lcm)}$ de l'équation 31, p. 100, sont les suivantes :

				- 1-
Moyenne	Ecart type	CV		$[mm.s^{-1}]$
9,6.10 ⁻²	5,0.10-1	516 %		
Minimum	Q10 %	Q50 %	Q90 %	Maximum
3,0.10 ⁻⁵	4,6.10 ⁻³	1,5.10 ⁻²	5,7.10 ⁻²	$3,5.10^{+0}$
			4	-

Distribution : Skewness 6,6 ; Kurtosis 42,7 ; test de Shapiro 2,33.10⁻¹⁵.

tableau 42 – Statistiques descriptives et de distribution de la conductivité hydraulique à saturation K_s .

La conductivité hydraulique à saturation est en moyenne de 0,096 mm.s⁻¹. Son coefficient de variation dépasse les 500 %, ce qui est normal pour cette propriété dont les valeurs s'étalent sur plusieurs ordres de grandeur. De plus, la propriété présente une asymétrie marquée vers les valeurs faibles, visible sur la figure 71 malgré l'échelle

logarithmique. La propriété est asymétrique et très serrée autour de son mode.

Ces caractéristiques sont très défavorables aux tests statistiques, qui demandent souvent des propriétés s'approchant un minimum de la normalité. Qui plus est, aucune transformation de la propriété n'a permis d'obtenir une propriété transformée dont la distribution s'approche de la loi normale.





2.3 Fraction d'eau immobile

Les matériels et méthodes de cette partie sont exposés page 120.

La mesure de la fraction d'eau immobile permet de connaître la fraction de la phase liquide du sol ne participant pas aux transferts convectifs de solutés. Bien que le modèle le plus simple de double porosité 'eau mobile' / 'eau immobile' considère que le rapport des deux volumes de porosité est constant, car il considère un régime permanent, il est probable que cette mesure est en fait dépendante du potentiel auquel est effectué la mesure (-1 cm dans notre cas).

Précision des mesures et respect des hypothèses

Pour être acceptable, la mesure de teneur en eau immobile doit réaliser un compromis entre les contraintes liées au flux en régime permanent, la hauteur d'eau infiltrée sous le disque, le coefficient de dispersion λ supposé et la gamme de valeurs possibles pour le coefficient α . Snow (1999) a étudié les erreurs de prédiction de la teneur en eau immobile en fonction de ces différents paramètres, et a défini pour différentes valeurs de λ (5, 20 et 50 mm) et α (0,5 ou 5 h⁻¹) les gammes de valeurs de flux et de hauteur d'eau infiltrée qui permettent une estimation correcte de la teneur en eau immobile. Alletto *et al.* (2006*a*) ont montré que les valeurs du coefficient α sont inférieures (voir très inférieures) à 0,5 h⁻¹ dans le secteur étudié. Ne connaissant pas le coefficient de dispersion λ , sa valeur est estimée à 20 mm (arbitrairement).

La figure 72 montre que – si les valeurs supposées de α et de λ sont justes – l'erreur de mesure de la teneur en eau immobile est la plupart du temps acceptable, voir souvent correcte (*si l'on extrapole les limites pour des flux plus élevés*). Trois infiltrations n'ont pas été conduites assez longtemps pour que l'infiltration cumulée soit suffisante.

On constate aussi que la gamme de valeur du flux en régime permanent est similaire à celle obtenue par Millot (2004) dans le même secteur (parcelle : $1,2 < Q < 36.6 \text{ cm.h}^{-1}$).

Par contre on constate une baisse de 40 % du flux (en moyenne) entre l'infiltration sans traceur et l'infiltration avec traceur (résultats non présentés ici). Cela montre que malgré les précautions prises, des perturbations (tassements ?) ont lieu au moment du changement d'infiltromètre, alors que le changement ne semblait pas poser de problème (visuellement).





Chaque croix représente une mesure d'infiltration avec traceur. Le cadre gris foncé représente la gamme de valeurs de Q et de I (infiltration cumulée) étudiée par Snow (1999). Dans ce cadre, les deux droites en pointillés longs délimitent grossièrement la zone où l'erreur de mesure e sur la teneur en eau immobile θ_{imm} est supérieure à 15 % ; la droite en pointillés courts délimite la zone où l'erreur sur la mesure de θ_{imm} est acceptable (< 15 %), mais pour laquelle les hypothèses de base (concentration en Br⁻ dans la phase mobile = concentration injectée ; concentration dans la phase immobile nulle) ne sont pas respectées. Il existe une zone 'hypothèses non respectées' en bas à droite du graphique, mais elle n'a pas été représentée (très proche de la limite e > 15%). $\alpha = 0,5 \text{ h}^{-1}$ et $\lambda = 20 \text{ mm}$.

Valeurs de fraction d'eau immobile

Moyenne	Écart type	CV		[%]
54,2%	25,7 %	47 %		
Minimum	Q10 %	Q50 %	Q90 %	Maximum
17,1%	25,0 %	49,1 %	87,5 %	99,7 %
				- 4

Distribution : Skewness 0,22 ; Kurtosis 1,56 ; test de Shapiro : $3,16.10^{-4}$.

tableau 43 – Statistiques descriptives de la teneur en eau immobile.

La fraction d'eau immobile est importante, puisqu'elle représente en moyenne 50 % du volume occupé par la phase liquide du sol. Quatre-vingt pourcent des valeurs s'étalent entre 25 % et 90 %, les valeurs les plus extrêmes étant probablement des erreurs de mesure. La propriété présente une distribution resserrée autour de ses modes, elle a donc un kurtosis élevé. Elle s'écarte de la normalité, et présente une allure clairement bimodale.



figure 73 – Graphique box & whisker de la fraction d'eau immobile.





2.4 Synthèse, discussion et conclusion intermédiaire

Les propriétés hydriques mesurées sont – de part leurs valeurs moyennes et leurs coefficients de variation - relativement en accord avec les données de la littérature exposées dans la partie 1.

La teneur en eau volumique à saturation mesurée est en moyenne de 46 %, ce qui est proche de la partie haute de l'intervalle des valeurs de la littérature (max : 48 %). Son CV de 10 % est par contre en accord avec ce qui est habituellement constaté. La teneur en eau à saturation ne dépend pas uniquement de la masse volumique apparente, mais cette dernière délimite en tout cas sa valeur maximale possible (porosité). D'après Vauclin (1982), la teneur en eau à la capacité au champ (θ_{pF2}) et la teneur en eau au point de flétrissent permanent ($\theta_{pF4,2}$) sont plus variables. C'est le cas pour $\theta_{pF4,2}$, mais pas pour θ_{pF2} . Cela suggère que la microporosité est plus variable que la porosité située entre θ_{s} et θ_{pF2} . Or cette porosité (moins variable) est aussi la plus susceptible d'être influencée par les pratiques agronomiques.

Le paramètre b, qui est lié à la pente de la droite $\theta(h)$ de la fonction de Campbell, est un peu plus variable que θ_{pF2} et $\theta_{pF4,2}$, qui ont servi à son calcul (CV de 24 %). De même, le CV de la **réserve utile** qui dépend aussi de ces deux paramètres est un peu plus élevé que celui des propriétés de base. Le potentiel au point d'entrée d'air, h_A , est le plus variable : son CV est de 109 %. Il dépend directement des 3 valeurs de θ citées plus haut, dont les variations semblent fortement répercutées sur h_A . On peut aussi se demander si la variabilité de ce paramètre reflète **l'inadéquation du modèle pour décrire le comportement de la courbe** $\theta(h)$ au voisinage de la saturation ou s'il s'agit d'une variabilité réelle des propriétés du sol.

Le paramètre h_A calculé étant fréquemment inférieur à -1 cm, la conductivité hydraulique à saturation est souvent égale à la conductivité à -1 cm, puisque le modèle de Campbell prévoit une conductivité constante entre h_A et h=0. Les valeurs de conductivité hydrauliques sont en moyenne dans la gamme des valeurs trouvées dans la littérature, qui oscillent généralement entre 1.10^{-3} et 1.10^{-1} mm.s⁻¹, mais elles couvrent une plage de conductivité assez large. Le CV de K_s est par contre plus élevé que les références de la littérature : 516 %, c'est presque 2 fois plus que la variabilité observée sur la base européenne par Nemes *et al.* (2005). Que ce soit pour sa valeur médiane ou sa valeur moyenne, le K_s mesuré est 5 à 6 fois plus

élevé que ce qui est observé dans la base européenne HYPRES.

La gamme de valeur (min-max) des K_s mesurés est 3 ordres de grandeur plus large que les valeurs mesurées sur la parcelle d'étude avec la méthode WIND, ou avec la méthode Beerkan (méthodes dont les gammes de variabilité sont ellesmêmes décalées d'un ordre de grandeur). Cependant, en moyenne, les K_s mesurés par infiltrométrie sur le secteur agricole ne sont 'que' 7 fois plus élevés que ceux obtenus sur la parcelle avec la méthode Beerkan.

Ces écarts permettent de relativiser les écarts de valeurs observés entre les différentes méthodes de traitement des mesures d'infiltration. L'écart entre la méthode White et Sully (1987) et la méthode Haverkamp *et al.* (1994; par ajustement linéaire ou direct) ne sont 'que' d'un facteur 2 environ (K_{-1cm} plus faible avec la méthode White et Sully, 1987).

Les valeurs de conductivité hydraulique obtenues sur la parcelle d'étude, avec les données collectées par Millot 2004, sont étonnamment proches de celles obtenues à l'échelle du secteur agricole, et ce, quelle que soit la méthode employée. Les implications de ce constat seront discutées plus loin.

Le principal problème soulevé par les différences de valeurs obtenues entre les méthodes n'est donc pas tant les écarts de conductivité moyenne, mais plutôt leur validité par rapport aux temps caractéristiques. Dans notre cas, la méthode Haverkamp et al. par ajustement linéaire ne permet pas toujours d'obtenir des valeurs de S et de K compatibles avec les temps caractéristiques (incompatibilité dans 42 à 56% des cas). La méthode par ajustement direct 'à triple contrainte' fonctionne mieux, mais elle n'est pas plus précise et elle est biaisée par l'effet du sable. Concernant la difficulté à estimer correctement S et K, Il est difficile de mettre en cause la méthode elle-même car de toute évidence les conditions de mesure ne sont pas idéales. Les teneurs en eau initiales au moment de la mesure sont trop élevées³⁷ et l'hypothèse d'une conductivité hydraulique initiale négligeable devant la conductivité finale n'est probablement pas respectée. On doit ensuite signaler plusieurs facteurs aggravants : (i) la mesure n'est pas assez précise (bulles, positions de lecture), (ii) il est difficile d'obtenir un nombre correct de points de mesure durant les 60 premières secondes de l'infiltration, pourtant cruciales pour la détermination de la sorptivité et (iii) le plateau de Ouarville est exposé au vent, ce qui n'est pas favorable à de bonnes mesures (et ce malgré l'installation de larges paravents, doublés si nécessaires de parasols couchés !). Une des solutions envisageables est l'utilisation d'infiltromètres à mesures automatisées.

Il faut aussi revenir sur **les effets possibles de la couche de sable intercalaire sur la mesure d'infiltration**. Avec la méthode de Haverkamp *et al.* par régression linéaire en dI/d $\sqrt{t} = f(\sqrt{t})$, le calcul de la sorptivité S, n'est théoriquement pas influencé par la couche de sable. Cependant, lorsque l'on teste la qualité de l'ajustement des paramètres S et K sur la courbe d'infiltration I = f(t), **un décalage se produit sur I** puisque la couche de sable joue effectivement sur l'infiltration. Lorsqu'on réalise un ajustement direct, non-linéaire, de S et de K sur la courbe I = f(t), la partie initiale de la courbe très influencée par le sable a certes été écartée, mais le reste de la courbe est toujours influencé par le sable de contact. L'ajustement direct intègre donc l'effet de cette couche de sable, ce qui biaise sans

³⁷ Les infiltrations réalisées à l'échelle du secteur agricole ont été réalisées en mars-avril-mai 2006, celles réalisées par Millot 2004 ont été réalisées en avril-mai 2004. Au début de cette saison la réserve utile du sol a été reconstituée (pendant l'hiver), mais les prélèvements d'eau par les céréales (ET) augmentent régulièrement avec la remontée des températures (au printemps).

doute l'estimation de S et K par cette méthode. Roulier (1999) a établi un jeu d'équations intégrant explicitement l'effet du sable, via deux paramètres : Isable et T_{Sable}. La détermination de ces paramètres nécessite cependant des mesures de terrain qui n'ont pas été effectuées dans notre cas. Avec les jeux de données dont on dispose, le choix est le suivant : utiliser une méthode de détermination dont on sait qu'elle surestime S assez nettement et qu'elle sous-estime K, car elle n'intègre pas la capillarité latérale, mais qui s'avère 'robuste' sur le jeu de donnée (White et Sully, 1987); utiliser une méthode qui prend en compte l'effet du sable et la capillarité latérale, mais qui nécessite de faire une régression linéaire sur des données très bruitées (dans notre cas), ce qui induit de fortes variations dans l'estimation de S (et donc de K), et qui produit 50 % de données qui ne respectent pas les temps caractéristiques (Haverkamp et al., 1994) ; utiliser une méthode qui ne prend en compte que très partiellement les effets du sable, mais qui s'avère plus robuste pour estimer des valeurs de S et K malgré les erreurs de mesures, et qui respecte les temps caractéristiques (ajustement direct des équations de Haverkamp et al.). C'est cette dernière méthode qui a été choisie, à défaut de disposer d'une alternative moins problématique.

Les teneurs en eau initiales trop élevées posent un autre problème : **l'infiltrométrie monopotentiel n'est probablement pas une méthode adaptée à la mesure de la conductivité des sols en hiver**, pourtant indispensable pour avoir une mesure correcte au moment où les transferts sont susceptibles d'opérer. Les alternatives sont les méthodes d'infiltrométrie multidisques, l'utilisation de perméamètres fonctionnant en saturé ou le prélèvement d'échantillons non perturbés pour la mesure de la conductivité hydraulique à saturation au laboratoire. Cette dernière solution a l'avantage du confort, mais elle n'est pas plus rapide, et elle n'intègre pas une éventuelle anisotropie des flux. Inversement, elle ne repose pas sur l'hypothèse erronée que le sol est un milieu semi-infini et isotrope (ne fût-ce que du fait de la présence du lit de semence, aux propriétés relativement différentes du reste de l'horizon). Les méthodes multipotentiels sont aussi limitées par la teneur en eau élevée du sol, qui rend l'infiltration lente aux potentiels les plus faibles. Elles ont par contre l'avantage de ne pas reposer sur l'estimation de la sorptivité.

Concernant la méthode Haverkamp *et al.* (1994), la mesure de la teneur en eau volumique sous l'infiltromètre manque de fiabilité (gouge). La correction par les valeurs de masse volumique apparente permet certes d'obtenir des valeurs plus réalistes, mais la probabilité que la masse volumique réelle sous l'infiltromètre soit différente de celle mesurée sur les cylindres est forte.

La mesure de la fraction d'eau immobile est l'occasion d'un constat intéressant : la fraction d'eau immobile mesurée à l'échelle du secteur agricole est en moyenne de 54,2 %. Sur un transect situé dans la parcelle d'étude, Millot (2004) avait mesuré une valeur moyenne de 53,3 %. Sur la même parcelle, Alletto *et al.* (2006*b*) ont mesuré (en 2004) sur 3 fosses des teneurs en eau immobile et ont obtenu une moyenne en surface de 53,3 %. **Ces résultats, et les résultats obtenus sur les conductivités hydrauliques, laissent à penser que les mesures à l'échelle de la parcelle sont représentatives du secteur agricole (pour K_s et la fraction d'eau immobile). L'implication de ces résultats sera discutée dans la discussion finale.**

Les valeurs de fraction d'eau immobile sont relativement variables, ce qui est en accord avec les données de la littérature. Le fait qu'en moyenne, le flux d'eau se réduise de 40 % entre l'infiltration sans traceur et l'infiltration avec traceur pose problème. Cette diminution peut refléter plusieurs choses : (i) un tassement du sol sous l'infiltromètre, qui provoque une baisse de porosité du sol (ii) la fermeture de certains pores lors du changement d'infiltromètre, par perturbation du sol, ce qui n'implique pas forcément des tassements importants mais peut être

une réduction de la continuité des pores (iii) lors du changement, la mince couche de sable est très perturbée (constat visuel). Un lissage délicat au couteau permet de la remettre horizontale, mais la perturbation ne peut-elle pas engendrer une hétérogénéité des flux sous l'infiltromètre, aboutissant à une baisse de flux ?

L'hypothèse (ii) remet clairement en cause la fiabilité des mesures de fraction d'eau immobile, car une réduction de la continuité des pores, et le fermeture de certains crée de facto une porosité captive, immobile, qui n'était pourtant pas immobile avant le changement d'infiltromètre. Si ce cas de figure est confirmé, les fractions d'eau immobile peuvent être surestimées.

Enfin, la variabilité spatiale élevée à extrêmement élevée des mesures de fraction d'eau immobile et de conductivité pose la question de leurs déterminismes, car les propriétés pédologiques (physico-chimiques) sont peu variables dans le secteur. Les tests statistiques doivent donner un point de vue supplémentaire sur ce constat.

Comportement de l'isoproturon dans les sols

■ 3.1 Adsorption de l'isoproturon dans les sols

Les paramètres de l'adsorption des molécules phytosanitaires sur la fraction organo-minérale du sol est une des propriétés déterminantes de son comportement, et donc de son éventuel transfert, dans les sols.

Coefficient d'adsorption linéaire

Le coefficient d'adsorption linéaire, le K_D , est le modèle le plus simple permettant de décrire l'adsorption de l'isoproturon dans les sols. Il s'agit d'une simplification du modèle de Freundlich, qui permet de limiter le nombre de mesures à effectuer.

Moyenne	Écart type	CV		$[L.kg^{-1}]$
1,10	0,25	23 %		
Minimum	Q10 %	Q50 %	Q90 %	Maximum
0,73	0,79	1,07	1,41	1,86
			· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	

Distribution : Skewness 0,7 ; Kurtosis 0,2 ; test de Shapiro 4,60.10⁻².

Le tableau 44 montre que le K_D moyen est de $1,1 \text{ g.kg}^{-1}$, et que sa variabilité est modérée, avec un coefficient de variation inférieur à 25 %. Le test de normalité de la propriété est presque significatif, la distribution de la propriété étant légèrement asymétrique. Quatre-vingt pour-cent des valeurs de K_D se situent entre 0,8 et $1,4 \text{ L.kg}^{-1}$.



tableau 45 – Graphique 'box & whisker' du coefficient d'adsorption linéaire K_D .

Coefficient d'adsorption normalisé par le carbone organique

La normalisation du K_D par la fraction de carbone organique permet de s'affranchir d'une partie de la variabilité du K_D liée à la matière organique du sol. C'est aussi un moyen relativement efficace de prédire le K_D à partir d'une valeur de K_{OC} acquise dans un contexte similaire et d'une mesure de teneur en carbone organique. Le coefficient de corrélation linéaire entre le K_D et la fraction de carbone organique est de 0,67. Les coefficients de corrélation trouvés dans la littérature sont généralement meilleurs.

Moyenne 82	Écart type 15	CV 18 %		$[L.kg^{-1}]$
Minimum	Q10 %	Q50 %	Q90 %	Maximum
55	64	81	101	120

Distribution : Skewness 0,4 ; Kurtosis -0,5 ; test de Shapiro **3,57.10**⁻¹.

tableau 46 – Statistiques descriptives et de distribution du coefficient d'adsorption normalisé par le carbone organique $K_{\rm OC}$.

Le K_{OC} a une valeur moyenne de 80 g.L^{-1} , une variabilité modérée (CV = 18 %) et 80 % de ses valeurs s'étalent entre 64 et 101 g.L^{-1} . La distribution de la propriété ne s'écarte pas significativement de la normalité.



tableau 47 – Graphique 'box & whisker' du coefficient d'adsorption linéaire K_{OC} .

K_D des horizons de surface et profonds de la parcelle d'étude

		F1-2	F2-2	F3-2	F4	F5
K _D	[L.kg ⁻¹]	1,18	1,09	0,96	1,05	1,22
K _{OC}	[L.kg ⁻¹]	86	77	87	76	102
C _{ORG}	[g.kg ⁻¹]	14	14	11	14	12
Argile	[g.kg ⁻¹]	260	306	232	303	230
CaCO ₃	$[g.kg^{-1}]$	0	2	1	7	0

□ Horizons de surface de la parcelle

tableau 48 $-K_D$ des horizons de surface de la parcelle d'étude.

Avec F1, F2, F3, F4 et F5 les 5 fosses ouvertes sur la parcelle d'étude (Coquet *et al.*, 2006) ; -1 ou -2 les numéros des 'réplicats' des fosses ; K_D le coefficient d'adsorption linéaire ; K_{OC} le coefficient d'adsorption normalisé par la fraction de carbone organique ; C_{ORG} la teneur en carbone organique ; 'Argile', la teneur en argile non-décarbonatée ; CaCO₃ la teneur en carbonate de calcium. Pour les mêmes horizons, les K_D mesurés par Alletto (2004) sur le t_0 des mesures de dégradation des fosses 1-1, 1-2 et 1-3 sont respectivement de 5,0, 4,1 et 4,1 L.kg⁻¹.

Les K_D mesurés sur des échantillons des horizons de surface de la parcelle sont en moyenne identique à ceux mesurés à l'échelle du bassin versant (moyenne de $1,10 \text{ L.kg}^{-1}$). Le coefficient de variation (CV) n'est que de 11 % (au lieu de 25 %), mais il est imprécis du fait du faible nombre de mesures. La teneur en carbone organique

moyenne de 13 g.kg⁻¹, presque identique à celle du secteur agricole (13,5 g.kg⁻¹), explique ces faibles différences, et probablement aussi la moindre dispersion des valeurs de K_D (pas d'effet des différences de pratiques culturales sur la teneur en carbone organique). De fait, le K_{OC} moyen est lui aussi très proche (86 L.kg⁻¹, comparé à 82 L.kg⁻¹ pour le secteur).

□ *Horizons profonds de la parcelle*

		F1-2, BT2	F2-2	F3-2, BT1	F4	F5, BT2.1
K _D	[L.kg ⁻¹]	0,45	-	0,34	-	0,37
K _{OC}	[L.kg ⁻¹]	71	-	60	-	62
CORG	[g.kg ⁻¹]	6	-	6	-	6
Argile	[g.kg ⁻¹]	344	-	352	-	333
CaCO ₃	[g.kg ⁻¹]	0	-	0	-	0

Horizons BT dérivés du limon, sans éléments grossiers

tableau 49 – K_D des horizons BT sans éléments grossiers de la parcelle d'étude.

Pour les mêmes horizons, le K_D mesuré par Alletto (2004) sur le t_0 des mesures de dégradation de la fosse 1-1 est de 0,9 L.kg⁻¹.

Le coefficient d'adsorption des horizons BT de la parcelle, dont la teneur en argile varie entre 30 et 40 %, est en moyenne de $0,39 \text{ L.kg}^{-1}$, soit à peine 1/3 de la valeur moyenne des horizons de surface. Les teneurs en carbone organique de ces horizons ne sont 'que' deux fois inférieures à celles des horizons de surface, ce qui montre que la réactivité globale de la phase solide (phase organo-minérale) est inférieure à celle des horizons supérieurs. Le K_{OC} est en effet inférieur de 10 à 20 L.kg⁻¹. Le faible nombre de mesures réalisées rend ces conclusions très relatives.

Horizons argileux lourds avec une charge modérée en graviers siliceux et/ou de meulière

		F1-2	F2-2	F3-2, IIC	F4	F5, IIC
K _D	[L.kg ⁻¹]	-	-	0,42	-	0,22
K _{OC}	[L.kg ⁻¹]	-	-	79	-	37
C _{ORG}	[g.kg ⁻¹]	-	-	5	-	6
Argile	[g.kg ⁻¹]	-	-	664	-	452
CaCO ₃	[g.kg ⁻¹]	-	-	5	-	0

tableau 50 $-K_D$ des horizons argileux lourds avec une charge modérée en graviers siliceux et/ou de meulière.

Pour les mêmes horizons, le K_D mesuré par Alletto (2004) sur le t_0 des mesures de dégradation de la fosse 1-3 est de 0,6 L.kg⁻¹.

Les constats effectués sur les horizons BT de la parcelle restent valables pour les horizons à argile lourde, même si une des deux valeurs de K_D mesurée presque deux fois inférieure. La teneur en argile très élevée de l'horizon IIC de la fosse 3-2 ne semble pas affecter son K_D en comparaison des teneurs plus faibles mesurées sur les horizons BT.

		F1-2, BT/C	F2-2, IIIC1	F3-2, IIIC1	– F	4 —	– F	5 —
					S	С	IIIC	IVC
K _D	[L.kg ⁻¹]	0,22	0,20	0,20	0,23	0,16	0,19	0,16
K _{OC}	[L.kg ⁻¹]	42	66	57	23	23	28	39
C _{ORG}	[g.kg ⁻¹]	5	3	4	10	7	7	4
Argile	[g.kg ⁻¹]	359	427	498	356	362	294	321
CaCO ₃	$[g.kg^{-1}]$	512	670	564	585	566	293	337

Horizons C ou S carbonatés

tableau 51 $-K_D$ des horizons C ou S carbonatés.

Pour les mêmes horizons, les K_D mesurés par Alletto (2004) sur le t_0 des mesures de dégradation des fosses 1-1, 1-2 et 1-3 sont respectivement, de 0,5, 0,3 et 0,3 L.kg⁻¹.

Le K_D des horizons carbonatés est très bas, avec une moyenne de $0,19 \text{ L.kg}^{-1}$. Il faut rapprocher cette valeur de l'erreur de mesure du K_D (erreurs et adsorption sur le verre et le bouchon des flacons), estimée expérimentalement en moyenne à $0,1 \text{ L.kg}^{-1}$. Malgré leur teneur relativement élevée en argile, et parfois en matière organique, les valeurs de K_D sont très basses comparées aux horizons de surface. La partie carbonatée du sol (argile, sables, graviers) semble donc relativement inerte pour l'Isoproturon.

3.2 Dégradation de l'isoproturon

La dégradation des molécules organiques dans les sols peut être décrite par une cinétique exponentielle de premier ordre. Le principal paramètre de cette cinétique est le coefficient de dégradation k, souvent transformé en DT_{50} , ou temps de demi-vie de dégradation de la molécule. Le calcul de ce paramètre est impératif, car il est indispensable pour la modélisation des transferts de pesticides. Plusieurs méthodes de calcul du paramètre sont possibles, et il s'est avéré que le choix de l'une ou de l'autre influence fortement le résultat (valeurs de la DT_{50}). Pour cette raison, les paragraphes suivants décrivent en détail les résultats obtenus avec les différentes méthodes.

■ Calcul par régression linéaire

La première méthode testée est la régression linaire sur les cinétiques de dégradation exprimée en $\ln(C) = \ln(C_0) - k.t.$ Deux variantes du calcul sont possibles, en fixant la valeur de C_0 à la concentration en isoproturon apportée aux piluliers de sol ou en calculant ce paramètre en même temps que k.

□ Influence de la concentration initiale : calculée ou imposée ?

– *Résultats*

Le tableau 52 montre que le calcul de la concentration initiale en isoproturon par la régression impose une translation des valeurs de DT_{50} par rapport à la régression avec une concentration initiale imposée. Les valeurs de cette dernière sont en moyenne inférieures de 4 jours aux DT_{50} estimées avec un C_0 'ajusté'. Quand elle est calculée, la concentration initiale dans le bocal a une valeur moyenne de 65 % de la molécule apportée théoriquement, avec 80 % de ces valeurs entre 48 et 79 %. Ces valeurs sont faibles et paraissent peu réalistes. Inversement, l'ajustement linéaire des droites $\ln(C) = f(t)$ est meilleur dans le cas où la concentration initiale est calculée, ce qui est

		C _(t=0) calculée			$C_{(t=0)}$ imposée		
	centiles:	10 %	50 %	90 %	10 %	50 %	90 %
DT50 _{IPU}	[jours]	20,5	25,2	36,5	17,5	21,0	31,2
C(t=0)	[% de l'apport]	48 %	65 %	79 %	100 %	100 %	100 %
RRSEP%		15 %	28 %	41 %	38 %	71 %	133 %
MAEP%		12 %	29 %	66 %	31 %	73 %	156 %

logique puisque la régression possède un degré de liberté supplémentaire. L'erreur a une valeur médiane de 30 % dans le premier cas, et de 71 % dans le second.

tableau 52 – Valeurs de DT_{50} calculées par régressions linéaires avec une concentration initiale imposée ou calculée.

Les équations de la RRSEP% et de la MAEP% sont exposés en annexe (équation 64, p. 289, et équation 66, p. 290, respectivement).

Exemples graphiques

L'examen des graphiques C = f(t) et ln(C) = f(t) permet de mieux comprendre les raisons pour lesquelles la qualité des ajustements est médiocre.

Les illustrations portent sur deux cas de figure assez contrastés (dans leurs résultats d'ajustement), le lit de semence du site 20 003 et celui du site 20 006. Le second présente une vitesse de dégradation initiale apparemment plus élevée, et une concentration finale plus faible.





Les ordonnées du graphique de droite présentent le logarithme népérien de la quantité de molécule, exprimée en % de la quantité apportée initialement.

Dans les cas où la dégradation de la molécule suit une décroissance logarithmique de premier ordre, la relation entre $\ln(C)$ et le temps est théoriquement linéaire. La figure 75 montre bien que ce n'est pas le cas, car la dégradation parait plus incurvée que ce qui est prédit par la cinétique d'ordre 1. Le fait qu'aucune extraction n'ait été effectuée entre J14 et J98 donne à ce dernier temps un poids important dans la régression, la droite a donc tendance à s'ajuster mieux à la fin de la dégradation qu'à la phase intermédiaire. Ce constat est encore plus net sur le graphique C = f(t).

J. Moeys | Partie IV





Les ordonnées du graphique de gauche présentent le logarithme népérien de la quantité de molécule, exprimée en % de la quantité apportée initialement.







Les ordonnées du graphique de droite présentent le logarithme népérien de la quantité de molécule, exprimée en % de la quantité apportée initialement.

Sur la figure 77, on peut constater que les ajustements effectués en calculant la concentration initiale au lieu de l'imposer (avec un point 'artificiel' de 100% au t_0) s'ajustent bien mieux aux valeurs mesurées. Cependant, ce meilleur ajustement se fait au prix d'un abaissement important des concentrations prédites C(t), au moment (C₀) et dans les jours qui suivent l'application du pesticide, la concentration initiale calculée (C₀) étant généralement assez faible.

J. Moeys | Partie IV



figure 78 – Exemples graphiques du calcul de la DT_{50} de l'isoproturon par régression linéaire, avec C₀ calculée. Lit de semence du site 20 006.

Les ordonnées du graphique de gauche présentent le logarithme népérien de la quantité de molécule, exprimée en % de la quantité apportée initialement.

Calcul par ajustement direct de la fonction de dégradation

Il est aussi possible de calculer la demi-vie de l'isoproturon par un ajustement direct, non linéaire, de l'équation 27 aux cinétiques. Plusieurs algorithmes d'optimisation sont utilisables (BFGS ou L-BFGS-B) et plusieurs calculs d'erreur sont possibles. La valeur initiale de DT_{50} utilisée lors des optimisations est de 20 jours ou 0.25 jours, pour les optimisations non-contraintes (BFGS) et contraintes (L-BFGS-B), respectivement.

□ Influence de l'algorithme d'optimisation et de la fonction d'erreur à minimiser pour l'optimisation

		contrainte	1	no	n contrair	nte
centiles:	10 %	50 %	90 %	10 %	50 %	90 %
DT ₅₀ [jours]	3,0	6,6	12,5	2,9	5,8	11,9
$C_{(t=0)}$ [% de l'apport], fixée à	100 %	100 %	100 %	100 %	100 %	100 %
RRSEP%	13 %	20 %	38 %	10 %	19 %	32 %
MAEP%	39 %	48 %	66 %	39 %	47 %	62 %

Influence de l'algorithme d'optimisation :

tableau 53 – Valeurs de DT_{50} calculées par ajustement direct par minimisation de la RRSEP%.

L'optimisation contrainte a été réalisée avec l'algorithme L-BFGS-B, tandis que l'optimisation non contrainte a été réalisée avec l'algorithme BFGS. La contrainte est la suivante : $[0,5 \text{ j} < DT_{50} < 1000 \text{ j}]$

Le tableau 53 montre des résultats très différents de ceux obtenus avec un ajustement par régression linéaire. Il y a 15 à 20 jours de différence entre les valeurs médianes des DT_{50} entre les 2 cas ci-dessus et les ajustements linéaires. Que

l'ajustement soit contraint ou non, les ajustements directs par minimisation de la RRSEP% aboutissent à une DT_{50} médiane de 6 à 7 jours environ, contre 21 à 25 jours pour les ajustements linéaires. Les intervalles de valeurs situées entre les quantiles 10 % et 80 %, ici de 3 à 12 jours, ne recroisent pas les valeurs de 17 à 30 jours obtenues par régression linéaire.

Contrairement à ce qui était observé avec les mesures d'infiltrométrie, le fait de contraindre l'ajustement de la fonction de dégradation de l'isoproturon change peu le résultat final. L'algorithme non-contraint BFGS donne toujours un résultat positif pour la demi-vie, donc l'utilisation de l'algorithme L-BFGS-B ne se justifie pas (ce dernier s'avère un peu moins robuste que le BFGS simple).

- Influence de la fonction d'erreur :

Au vu des grandes différences de valeurs de concentration en isoproturon existant entre les premiers et les derniers temps d'extraction, il paraissait nécessaire de tester un calcul de l'erreur qui ne néglige pas les valeurs les plus faibles. La MAEP% (voir l'équation 66, p. 290, en annexe) permet cela Pour des raisons de stabilité détaillées plus loin ('Analyse *a posteriori* des fonctions d'erreur', p. 197), l'ajustement avec cette fonction d'erreur a été réalisée sans algorithme d'optimisation, mais par la recherche systématique d'une erreur minimum (le procédé est plus lent, mais plus fiable).

		contrainte	
centiles:	10 %	50 %	90 %
DT50 [jours]	4,5	6,8	31,3
C _(t=0) [% de l'apport], <i>fixée à</i>	100 %	100 %	100 %
RRSEP%	10 %	28 %	54 %
MAEP%	31 %	40 %	50 %

tableau 54 – Valeurs de DT50 calculées par minimisation de la MAEP%.

L'utilisation de la MAEP% ne change pas fondamentalement la valeur médiane de la DT_{50} , mais elle provoque un étalement des valeurs vers des DT_{50} beaucoup plus élevés que précédemment. Quatre-vingt pourcent des valeurs sont situées entre 4,5 et 31,3 jours.

– Exemples graphiques

La figure 79 illustre bien les différences entre la méthode d'ajustement linéaire graphique et la méthode d'ajustement direct. Sur le graphique A, on constate que, contrairement à la méthode d'ajustement linéaire, l'ajustement direct avec une minimisation sur la RRSEP% privilégie la première partie de la courbe, au détriment du dernier temps d'extraction qui est mal modélisé.

Inversement, l'ajustement direct avec une optimisation sur la MAEP% (graphique B) privilégie un ajustement sur la fin de la courbe. les deux calculs d'erreurs semblent avoir un optimum différent. La méthode MAEP% est plus sensible aux erreurs de prédiction sur les mesures présentant une faible concentration en isoproturon que la RRSEP% (pour être exact, la MAEP% calcule une erreur relative à chaque mesure, elle est donc moins dépendante des différences de concentration d'une extraction à l'autre).

La figure 80 présente cas un peu différent de celui de la figure 79. Comme dans le cas précédent, une minimisation de l'erreur sur la RRSEP% aboutit à privilégier les

J. Moeys | Partie IV

premières mesures de la courbe. Mais à l'inverse du cas précédent, une minimisation de l'erreur sur la MAEP% aboutit cette fois à privilégier aussi le début de la courbe. La concentration plus basse en isoproturon à 98 jours explique certainement cette différence, l'erreur relative d'ajustement de la courbe devenant moins importante dans ce cas.



A - Optimisation sur la RRSEP% B - Optimisation sur la RRSEP%

B – Optimisation sur la MAEP%

figure 79 – Exemple graphique du calcul de la DT₅₀ de l'isoproturon par ajustement direct. Site 20 003–P1.

L'optimisation sur la MAEP% (B) est, de par la procédure d'ajustement choisie, contrainte. Pour les deux exemples choisis, les ajustements sur la RRSEP% contraints ou non-contraints (A) donnent des résultats quasiment identiques. Le résultat des ajustements contraints n'est donc pas présenté, même s'il donne dans d'autres cas un résultat différent. Les erreurs d'ajustement indiquées sur le graphique correspondent à la RRSEP% (A) et à la MAEP% (B).









Autres éléments influençant le résultat

La méthode de minimisation de la RRSEP% par un algorithme d'optimisation est sensible à plusieurs autres éléments, non développés ci-dessus.

 Le fait de prendre les valeurs d'erreur en fraction ou en pourcentage (RRSEP vs RRSEP%) peut changer le taux de succès de l'optimisation.

Ce point peut partiellement être compensé par la fonction d'optimisation en précisant un **facteur d'échelle** pour le paramètre à ajuster et un facteur d'échelle pour la fonction d'erreur, de manière à ce qu'une variation d'une unité du paramètre ajusté provoque, autant que possible, une variation d'une unité sur la fonction d'erreur (*notice de la fonction 'optim*).

- Il n'est pas exclu que Les valeurs initiales de DT₅₀ utilisées aient pu influencer le résultat, même si plusieurs valeurs de départ ont été testées initialement.
- Les paramètres internes de 'optim' pour les méthodes BFGS et L-BFGS-B (facteurs de 'tolérance' du 'gradient' pour déterminer si l'algorithme a convergé...).

Ces facteurs ont été ajustés empiriquement. Le principal objectif était d'assurer une **convergence systématique** de l'algorithme afin que celui-ci n'échoue pas sur certaines mesures de dégradation.

Choix d'une des méthodes testées

Comme suspecté initialement le choix de la méthode de calcul de la DT_{50} de dégradation de l'isoproturon est crucial. Il est nécessaire d'en choisir une puisque la plupart des modèles de dégradation ne prennent en compte que les dégradations suivant une simple exponentielle de premier ordre.

□ Analyse a posteriori des fonctions d'erreur

Comme pour les ajustements directs des mesures d'infiltration, il peut être intéressant de visualiser l'erreur d'ajustement entre les quantités d'isoproturon prédites et les quantités réelles, en fonction des valeurs possibles de DT_{50} , afin de bien comprendre les différences entre les fonctions d'erreur testées (RRSEP% et MAEP%):

La figure 81 montre très clairement que la fonction d'erreur MAEP% présente deux minimums locaux, tandis que la RRSEP% n'en présente qu'un seul. Ces graphiques confirment donc que l'ajustement par un algorithme de minimisation sur la RRSEP% est pertinente, tandis qu'elle est plus délicate dans le cas d'une minimisation sur la MAEP%. L'algorithme peut en effet converger vers l'un ou l'autre des optimums locaux, selon les valeurs initiales de DT_{50} choisies ou son mode de fonctionnement. L'approche plus systématique qui a été retenue dans le cas de la MAEP% est moins rapide, mais plus robuste. **Elle permet en outre de repérer aussi les optimums locaux**.

J. Moeys | Partie IV





Les courbes tracées représentent l'erreur entre les valeurs de teneurs en isoproturon mesurées et les valeurs estimées, selon deux modalités de calcul de l'erreur (RRSEP% et MAEP%); les droites verticales représentent la valeur de DT₅₀ obtenue après optimisation sur l'une ou l'autre des fonctions d'erreur. La flèche 'DT₅₀ départ' indique la valeur initiale utilisée pour l'optimisation de la RRSEP%, la MAEP% ayant fait l'objet d'une recherche de minimum(s) 'systématique', du fait des minimums locaux visibles sur ces graphiques.

□ Comparaison visuelle des résultats

Le graphique box & whisker de la figure 82 confirme visuellement les résultats présentés ci-dessus : la méthode de calcul de la demi-vie de l'isoproturon affecte très fortement les valeurs de DT_{50} estimées, tant pour leurs valeurs médianes que pour leur dispersion.

Il existe une nette segmentation entre les méthodes linéaires et les méthodes directes, ces dernières ayant globalement des valeurs de DT_{50} estimées bien plus faibles. Non seulement les valeurs médianes de DT_{50} estimées sont nettement différentes entre les cas linéaires et les cas directs, mais les gammes de valeurs ellesmêmes se distinguent. La méthode de calcul direct avec une optimisation non contrainte sur la MAEP, cas de la 'valeur maximale', se distingue des autres par sa valeur médiane, proche de celle obtenue avec un ajustement linéaire direct (C_0 ajusté), mais une très forte dispersion des valeurs.

Une analyse de la variance sur les valeurs de la demi-vie, obtenues en fonction de la méthode, conclu à un effet très significatif de la méthode utilisée (probabilité de $2,2.10^{-16}$ d'observer de telles différences alors qu'il n'y a pas d'effet méthode).



figure 82 – Graphique 'box & whisker' des demi-vies (DT₅₀) de dégradation de l'isoproturon estimées selon les 7 méthodes de détermination testées.

Avec 'Lin.' pour les ajustements par régression linéaire sur $\ln(C_{IPU}) = f(t)$, avec une valeur de C_0 (Concentration en isoproturon au temps 0) fixée à 100 % de C_{IPU} initiale ou ajustée ; 'Dir.' pour les ajustements directs sur $C_{IPU} = f(t)$, optimisés alternativement sur la RRSEP% ou la MAEP% ; 'cont.' pour les ajustements avec une contrainte minimale et maximale pour les valeurs de DT₅₀ ; 'non cont.' pour les ajustements non contraints. La méthode MAEP% est de fait contrainte. La vibrisse manquante du cas 'MAEP direct' (optimum général) indique qu'il n'y a pas de valeurs entre le quantile 75 % (Q_{75%}) et les valeurs extrêmes au-delà de Q_{75%} + 1,5 . (Q_{75%}-Q_{25%}).

□ Choix d'une méthode

La méthode qui a été retenue est la **méthode de calcul direct avec une** optimisation non contrainte sur la MAEP%. Les autres méthodes tendent à privilégier un ajustement sur le début de la courbe de dégradation (ajustement direct) ou sur la fin de la courbe (ajustement linéaires). Cela s'explique par le fait que la dégradation est en réalité souvent bi-exponentielle. La méthode retenue privilégie alternativement le début de la courbe quand la cinétique devient nettement biexponentielle (et/ou quand la concentration en isoproturon à 98 jours est faible), et la fin de la courbe dans les autres cas.

Pour ces raisons, il semble que ce soit la seule méthode qui ne minimise pas la variabilité de la dégradation.

Moyenne	Écart type	CV		[jours]
12	11	91 %		
Minimum	Q10 %	Q50 %	Q90 %	Maximum
1	5	7	31	38

Le tableau ci-dessous résume les caractéristiques de la DT₅₀ retenue :

Distribution : Skewness 1.2 ; Kurtosis –0.2 ; test de Shapiro 1.2.10⁻⁸.

tableau 55 – Statistiques descriptives et de distribution de la demi-vie de dégradation de l'isoproturon.

Le choix des valeurs de DT_{50} obtenues par la méthode MAEP% présente l'inconvénient d'aboutir à une propriété (1) très variable, avec un coefficient de variation de 91% (2) s'écartant très significativement de la normalité. La distribution de cette

dernière est même bimodale, comme le montre le graphique ci-dessous :



figure 83 – Histogramme de la DT_{50} estimée par minimisation de la MAEP%.

La courbe rouge représente les fréquences théoriques d'une propriété distribuée normalement ayant la même moyenne et le même écart-type de la DT_{50} .

Cette bimodalité peut poser problème pour les tests statistiques présentés plus loin, mais quelques essais ont montré que ces tests n'étaient pas plus concluants en utilisant les valeurs de DT_{50} issues des autres méthodes de calcul.

Demi-vie de minéralisation de l'isoproturon

La demi-vie de minéralisation de l'isoproturon a été évaluée de la même façon que sa demi-vie de dégradation. Les cinétiques de minéralisation, non présentées ici, ne présentent pas d'allure bi-exponentielle marquée comme c'est le cas de la dégradation.

Moyenne	Écart type	CV		[jours]
173	99	57 %		
Minimum	Q10 %	Q50 %	Q90 %	Maximum
29	42	162	286	394

Distribution : Skewness 0,4 ; Kurtosis –0,7 ; test de Shapiro 5.0.10⁻².

tableau 56 – Statistiques descriptives et de distribution de la demi-vie de minéralisation de l'isoproturon.

Le temps de demi-vie de minéralisation est très élevé avec 173 jours en moyenne. Son coefficient de variation, 57 %, est lui aussi conséquent. La propriété ne s'écarte pas de la normalité.



tableau 57 – Graphique 'box & whisker' de la demi-vie de minéralisation de l'isoproturon.

3.3 Synthèse, discussion et conclusion intermédiaire

La mesure de l'adsorption de l'isoproturon dans les sols de Ouarville donne un K_D moyen de $1,10 \text{ kg}.\text{L}^{-1}$, avec un coefficient de variation de 23 %. Les données de la littérature scientifique indiquent que le K_D peut varier entre 0,85 et 4,4 kg.L⁻¹, et

son CV entre 11 et 41 %. L'adsorption de l'isoproturon dans les sols de Ouarville est donc relativement faible comparé à ces valeurs, et son CV est intermédiaire.

Le constat pour le coefficient d'adsorption normalisé par le carbone organique, K_{OC} est similaire : les valeurs de K_{OC} mesurées sont dans l'intervalle intermédiairebas par rapport à ceux de la littérature, et le CV de 18 % mesuré est intermédiaire par rapport aux 11 à 46 % de la littérature consultée. Les bases de données internationales indiquent que le K_{OC} de l'isoproturon peut varier enter 36 et 241 kg.L⁻¹, et que sa moyenne se situe aux alentours de 120 kg.L⁻¹, ce qui correspond à la valeur maximale mesurée à Ouarville.

Cette analyse amène deux constats : utiliser des données de K_{OC} de la littérature ou des bases de données internationales conduirait à surestimer le K_{OC} , et donc *'potentiellement'* à sous-estimer les transferts. Ce biais est en accord avec ce qui a déjà été constaté par Coquet *et al.* (2005*b*).

Le deuxième point soulevé par ces valeurs de K_{OC} relativement basses est la question de leur 'causes' agronomique ou pédologique. Les études statistiques exposées plus loin ont pour but d'y répondre.

Enfin, il faut souligner qu'il est assez difficile de comparer des valeurs de K_D , K_F ou K_{OC} obtenus avec des méthodes différentes, à des concentrations en pesticides différentes et/ou à des rapports sol/eau différentes. L'effet méthode est potentiellement important, comme le montre les différences obtenues entre les données de Alletto (2004) et cette étude, pour les horizons de surface de la parcelle d'étude. Il est possible, et il serait intéressant de recalculer des K_D à partir de valeurs de K_F (ou du n_F ; ou du rapport sol eau et concentration en pesticide apporté) de la littérature, afin de disposer d'une base de comparaison plus fiable.

Les K_D mesurés sur les sols de surface de 5 sols de la parcelle donnent un résultat intéressant : le K_D est en moyenne de $1,1 \text{ L.kg}^{-1}$, comme sur le secteur agricole. Les valeurs de K_{OC} sont, elles aussi, très proches. On peut argumenter que certes, les teneurs en matière organique et la granulométrie des sols de surface de la parcelle est assez proche de ce qui est mesuré à l'échelle du secteur agricole, mais il n'aurait pas été surprenant d'avoir des différences liées aux pratiques agronomiques qui varient d'une parcelle à l'autre.

L'adsorption de l'isoproturon baisse de manière critique dès que l'on passe sous l'horizon labouré : le K_D est divisé par 3 par rapport à la surface dans les horizons BT, par 3 (ou plus ?) dans les horizons argileux, et par 5 dans les horizons carbonatés à la base du sol. Les mesures sont peu nombreuses, notamment pour les horizons argileux, ce qui rend les conclusions incertaines, mais cela étaye l'hypothèse de départ que l'horizon de surface est une 'zone critique' déterminante dans le comportement de l'isoproturon.

La demi-vie de dégradation de l'isoproturon (DT_{50}) est de 12 jours en moyenne et s'étale de 1 à 38 jours, avec un CV de 91 %. La distribution de ces valeurs est bimodale, ce qui reflète probablement plus l'effet de la méthode qu'une réelle segmentation des sols. Les cinétiques de dégradation exhibent souvent une allure biphasique. Il existe probablement un seuil d'incurvation au-delà duquel l'ajustement est meilleur en privilégiant le début de la dégradation, et en deçà duquel l'ajustement est meilleur en privilégiant la fin de la dégradation. Mais si on peut attribuer la bimodalité de distribution des valeurs de DT_{50} à la méthode employée, l'étalement des valeurs reflète une réalité : la dégradation est d'abord rapide, puis ralentit de manière plus prononcée que dans le cas d'une cinétique de premier ordre. Suivant que l'on s'intéresse au début ou à la fin de la dégradation, on peut privilégier, par le choix de la méthode d'ajustement, l'ajustement sur l'une ou l'autre partie de la cinétique. La méthode d'ajustement retenue est un compromis entre les deux, même si l'idéal serait d'ajuster une cinétique double et de pouvoir en intégrer les paramètres dans un modèle qui la prend en compte.

La DT_{50} moyenne obtenue est, à 1 ou 2 jours près, en concordance avec les **données moyennes de la littérature** (13,7 jours avec les données présentées dans la partie bibliographie). Le CV de la DT_{50} est par contre plus important que ce qui est généralement observé, ce qui confirme le risque de sous-estimer la variabilité en utilisant les données de la littérature. La DT_{50} moyenne donnée par la base de données Footprint PPDB (2007) est aussi de 12 jours. Charnay *et al.* (2005) ont mesuré, dans un contexte un peu différent, une DT_{50} de 13 jours. Les données d'Alletto *et al.* (2006a), obtenues sur les sols de surface de 3 fosses de la parcelle d'étude, sont étonnamment proches, avec une DT_{50} de 11 jours.

La DT_{50} de minéralisation du pesticide est moins variable, et suit correctement une cinétique de 1^{er} ordre. Il faut près d'une demi-année, ou une saison culturale, pour que l'essentiel de l'isoproturon (> 50%) et de ses métabolites soit minéralisé, et donc dissipé (à 22°C et 90 % de la capacité au champ).

Étude statistique de la variabilité spatiale et des déterminismes agropédologiques

La seule estimation de ses propriétés n'apporte que peu d'informations sur un milieu complexe comme le sol. La mise en évidence des liens qui existent entre les différentes propriétés présente un grand intérêt. Même si un lien statistique n'est pas un lien causal, mais plutôt une variation concomitante suffisamment nette pour ne pas être attribuée au hasard, il n'en est pas moins un jalon dans la compréhension du fonctionnement du système. Ces variations concomitantes peuvent ensuite être 'modélisées' par des régressions ou d'autres outils, dans le but de quantifier la relation entre deux propriétés, et parfois dans le but d'utiliser une propriété (plus) simple à mesurer pour en estimer une autre, plus difficile à mesurer, là où des mesures sont disponibles pour la première mais pas pour la seconde (voir ci-dessous).

La logique d'organisation de ce chapitre est d'examiner dans un premier temps les liens des propriétés deux à deux. Soit par le calcul de coefficients de corrélation si les deux propriétés sont quantitatives, soit par des analyses de la variance quand une des propriétés est quantitative et l'autre qualitative. Dans un second temps, les liens des propriétés quantitatives 'de plusieurs à plusieurs' (approche multivariée) et avec les échantillons analysés sont examinés au moyen d'une décomposition de la variabilité par une analyse en composantes principales. Le positionnement des propriétés quantitatives est examiné visuellement en parallèle des propriétés qualitatives (mais elles n'interviennent pas dans la décomposition de la variabilité par ACP). Enfin, stade ultime de l'analyse, une modélisation des variations des propriétés quantitatives explicatives), puis par régressions multivariées, est calibrée et évaluée de manière semi-indépendante.

Contrairement aux chapitres précédents, les **'synthèses, discussions et conclusions**' sont exposées au fur et à mesure des analyses.

■ 4.1 Transformer les propriétés non-normales ?

Plusieurs des propriétés mesurées, présentées dans les paragraphes précédents, présentent des distributions qui semblent s'écarter de la normalité, parfois assez nettement. Ces propriétés sont notamment la profondeur du sol, les fractions grossières du sol (sable, graviers, cailloux) ou les paramètres qui y sont liés (CaCO₃), plusieurs propriétés qui dépendent aussi des pratiques agronomiques (carbone organique, paramètres h_A et b des fonctions de rétention en eau, K_{-1cm} et $K_{S.}$), ainsi que la demi-vie de dégradation de l'isoproturon dans le sol.

Des transformations de ces propriétés permettant d'obtenir une distribution plus proche de la normalité ont pu être identifiées pour la plupart de ces propriétés (réduction de l'asymétrie, amélioration du test de Shapiro). Cependant les tests de corrélation, d'analyse de la variance ou de régressions multivariées avec ces propriétés transformées se sont avérés souvent très décevants (forte détérioration des résultats des tests statistiques). La présence de deux ou plusieurs populations d'observations, et donc de distributions en réalité bi- ou plurimodales expliquent probablement ce constat (sols carbonatés/calcaires ou non; travail du sol conventionnel ou travail du sol simplifié).

Les tests statistiques non-paramétriques sur les propriétés non-transformées ont donné des résultats plus satisfaisants. C'est donc cette solution qui a été retenue (quand elle était possible) pour palier au problème des propriétés s'écartant de la normalité. Par souci de cohérence, et bien que les tests nonparamétriques soient moins puissants que leurs homologues paramétriques, ces tests ont été utilisés sur toutes les propriétés (normales et non normales).

4.2 Corrélations entre propriétés caractéristiques du système pédologique

	Argile	Limon	Sable	E.G. tot.	CaCO ₃
Argile	-				
Limon	- 0,89	-			
Sable	0,45	- 0,77	-		
E.G. tot.	0,60	- 0,66	0,49	-	
CaCO ₃	0,66	- 0,70	0,56	0,61	-
Profond.	- 0,67	0,62	- 0,43	- 0,59	- 0,79

Cohérence du système pédologique

tableau 58 – Corrélations des propriétés pédologiques quantitatives entre elles.

Coefficient de corrélation de **Spearman**; E.G. tot.: teneur en éléments grossiers totaux $[g.kg^{-1}]$; Profond. : Profondeur du sol, mesurée par un sondage tarière. Sur toutes les corrélations testées, le plus petit coefficient de corrélation significatif est de 0,32, une valeur relativement proche du seuil de 0,28 que l'on peut calculer pour le coefficient de Pearson (<u>alpha = 5%</u>; n = 50 observations). <u>Toutes les corrélations présentées sont significatives</u>. Les corrélations <u>les plus significatives</u> sont en gras (significatives au seuil alpha de 0,1 %, soit r >= 0,47).

Les coefficients de corrélation entre les propriétés pédologiques quantitatives permettent de dégager les principales caractéristiques du système pédologique local, et complètent de fait les observations de terrain. La portée de cette analyse est toutefois limitée par le fait que de nombreuses propriétés n'ont été mesurées que dans l'horizon de surface. Les corrélations informent sur les variations concomitantes des propriétés deux à deux, mais pas sur les relations de cause à effet ou sur les associations multiples de propriétés.

	Argile	Limon	Sable	E.G. tot.	CaCO ₃
Profond.	-0,48	0,43	(-0,22)	-0,44	-0,31

tableau 59 – Coefficients de corrélation de Pearson pour la profondeur du sol (exemple pour comparaison avec le coefficient de Spearman).

Les corrélations non significatives sont entre parenthèses.

La profondeur du sol est un élément essentiel de l'étude du système pédologique local. On constate sur le tableau 58 que **plus le sol est profond** :

- Moins l'horizon de surface est argileux ($r_s = -0,67$) et, mécaniquement, plus il est limoneux ($r_s = 0,62$) ;
- Moins l'horizon de surface est chargé en éléments grossiers ($r_s = -0.59$);
- Moins l'horizon de surface est carbonaté ($r_s = -0,79$).

Ce constat est tout à fait cohérent avec ce qui avait déjà été constaté à l'échelle parcellaire dans le secteur (Moeys *et al.*, 2006) : le substrat est invariablement un matériau calcaire, sur lequel s'est déposée une épaisseur variable de limon éolien. Moins le sol est épais, plus il contient d'inclusions du matériau calcaire sous-jacent : éléments grossiers calcaires ou de meulières, carbonates, et fractions argileuses issues de la décarbonatation du calcaire. La présence possible d'argile à meulière entre le calcaire et le limon semble confirmer le lien entre profondeur du sol et teneur en argile de surface. Le limon, sans doute peu carbonaté à l'origine, ne contient plus de fractions carbonatées, ce qui renforce la corrélation entre les fractions carbonatées fines ou grossières et la profondeur du substrat calcaire.

La teneur en éléments grossiers est assez bien corrélée à la teneur en carbonates ($r_s = 0,61$) et à la teneur en sables ($r_s = 0,56$). On pourrait s'attendre à de meilleures corrélations, mais il faut tenir compte du fait que ces fractions grossières ne sont pas exclusivement carbonatées. Une part non négligeable de la fraction grossière peut être constituée de meulière, ainsi que de sables et graviers quartzeux (du Burdigalien). La répartition de ces deux éléments étant moins systématiquement liée à la présence du calcaire à faible profondeur, cela atténue probablement les corrélations entre les fractions grossières.

On ne peut pas non plus écarter les effets anthropiques tels que l'accumulation de cailloux sur les chemins, haies et bords de parcelle, un effet direct du chaulage ou un effet indirect par apport de graviers quartzeux avec le calcaire amendé³⁸.

Le tableau 59 montre bien que, pour une propriété s'écartant de la normalité comme la profondeur du sol, l'utilisation du coefficient de corrélation de Spearman permet de mettre en évidence des corrélations qui n'apparaissaient pas avec le coefficient de Pearson. Pour les propriétés normales, les différences entre les deux coefficients sont généralement – et sauf exception – assez faibles (r +/- 0,1).

³⁸ Cette hypothèse est une explication plausible à la présence fréquente, mais en petite quantité, de ces graviers dans l'horizon de surface (de limon), alors qu'on ne le retrouve pas forcément en profondeur. La présence de ces graviers dans le calcaire (et dans les argiles à meulières) est plus fréquente, et en quantités beaucoup plus importantes, d'où l'hypothèse d'un apport par le calcaire utilisé pour le chaulage.

Propriétés liées aux pratiques agronomiques

Les propriétés que l'on peut logiquement associer aux pratiques agronomiques sont la teneur en carbone organique, la teneur en azote total, le rapport carbone sur azote (C/N), ainsi que la masse volumique apparente du sol. La teneur en argile et la profondeur du sol sont aussi présentées dans le tableau ci-dessus pour faire le lien avec d'autres propriétés pédologiques. Les propriétés hydrologiques, qui peuvent dépendre des caractéristiques pédologiques du sol comme des pratiques agronomiques (pour l'horizon de surface) sont présentées dans un paragraphe indépendant.

Le tableau 60 montre que si, le carbone et l'azote total sont très corrélés ($r_s = 0.95$), le rapport qui en dérive est peu corrélé au carbone organique ($r_s = 0.44$) et n'est pas corrélé à l'azote total. La masse volumique apparente n'est significativement corrélée à aucune propriété agronomique ou pédologique (à l'exception des propriétés hydrologiques présentées ci-dessous). La teneur en carbone organique est un peu corrélée à la teneur en argile (ainsi qu'à la teneur en CaCO₃ ; $r_s = 0.47$), une teneur plus élevée en argile (ou en CaCO₃) pouvant induire une teneur en carbone plus élevée. De la même manière, et probablement pour la même raison, la teneur en carbone est corrélée négativement à la profondeur du sol ($r_s = -0.47$).

	C _{ORG.}	C sur N	N _{TOT.}	D_{APP}
C _{ORG.}	-			
C sur N	0,44	-		
N _{TOT.}	0,95	(0,20)	-	
$ ho_b$	(-0,28)	(-0,18)	(-0.30)	-
Argile (ND)	0,48	(0,13)	0,48	(-0,25)
Profond.	-0,48	(-0,19)	- 0,45	(0,22)

tableau 60 – Corrélations des propriétés quantitatives pédologiques ou agronomiques entre elles.

Coefficient de corrélation de **Spearman**. Les valeurs entre parenthèses ne sont pas significatives (alpha = 5 %, n = 50). ρ_b : masse volumique apparente.

Propriétés de rétention en eau du sol

	$\theta_{SAT.}$ (pF0)	$\theta(pF2)$	θ(pF4,2)	R.U.	h _A
$\theta_{\rm S}$	-				
$\theta(pF2)$	(-0,29)	-			
θ(pF4,2)	(-0,14)	0,48	-		
R.U.	(-0,09)	0,51	-0,43	-	
h _A	0,71	-0,73	(-0,05)	-0,66	-
ʻb'	(0,03)	(-0,15)	0,75	-0,89	0,46

□ *Corrélations des propriétés entre elles*

tableau 61 – Corrélations des propriétés de rétention en eau entre elles.

Les cellules grisées mettent en évidence les cas où une propriété est dérivée d'une autre, ce qui rend plus probable les corrélations. Les valeurs entre parenthèses ne sont pas significatives. $\theta_{s.}$, $\theta(pF2)$ et $\theta(pF4,2)$, les teneurs en eau volumiques à saturation, à pF 2 et à pF 4,2, respectivement ; R.U., la réserve utile du sol ; h_A et b, le potentiel au point d'entrée d'air et le paramètre de forme (respectivement) de la fonction de $\theta(h)$ de Campbell (1974).

En dehors des corrélations pouvant s'expliquer par le fait qu'une des propriétés dérive de l'autre, on constate une corrélation positive entre les teneurs en eau aux pF 2

et 4,2 ($r_s = 0,48$), quand l'une est basse, l'autre tend à l'être aussi. De même, la réserve utile est négativement corrélée aux paramètres h_A et b, ce qui est aussi assez logique (h_A et b dérivent des mêmes paramètres que la réserve utile).

Corrélations des propriétés avec d'autres propriétés agro-
pédologiques.

	Limon (ND)	E.G. tot.	CaCO ₃	C _{ORG.}	Profond.
$\theta_{\rm S}$	(0,16)	(0,14)	0,36	0,39	(-0,32)
$\theta(pF2)$	(0,10)	(0,00)	(-0,12)	(-0,11)	(-0,07)
θ(pF4,2)	-0,56	0,46	0,39	(-0,18)	(-0,32)
R.U.	0,60	-0,33	-0,51	(-0,02)	0,36
h _A	-0,41	(0,28)	0,50	(0,18)	0,34
ʻb'	-0,68	0,47	0,55	(0,07)	-0,43

tableau 62 – Corrélations des propriétés de rétention en eau avec les propriétés agropédologiques.

Les valeurs entre parenthèses ne sont pas significatives. Limon (ND), la teneur en limon (non décarbonatée) ; E.G. tot. la teneur en éléments grossiers totaux ; $CaCO_3$ la teneur en carbonate de calcium ; C_{ORG} la teneur en carbone organique ; Profond. : la profondeur du sol.

Des 3 fractions granulométriques fines, c'est la teneur en limon qui est la mieux corrélée à certaines propriétés hydriques. **Plus la teneur en limon est élevée**, plus la teneur en eau à pF4,2 est faible ($r_s = -0,56$), plus la réserve utile est importante ($r_s = 0,60$), et plus le paramètre b est faible ($r_s = -0,68$). Les teneurs en éléments grossiers et en carbonates ont des liens similaires avec les propriétés hydriques mais d'intensité variable. Une valeur élevée de la teneur en éléments grossiers ou en CaCO₃ est liée à une teneur en eau à pF 4,2 plus élevée ($r_s = 0,46$ et 0,39), une réserve utile plus faible ($r_s = -0,33$ et -0,51) ou encore un paramètre 'b' plus élevé ($r_s = 0,47$ et 0,55).

Les teneurs en carbone organique élevées sont (modérément) associées à des teneurs en eau à saturation élevées. Ce lien est probablement un effet fortuit des pratiques agronomiques (lit de semence des parcelles en travail simplifié avec plus de carbone organique), ou un effet des matières organiques sur la capacité du sol à retenir l'eau.

La profondeur du sol est positivement, mais faiblement, liée à la réserve utile de l'horizon de surface, ainsi qu'au paramètre h_A , et négativement liée au paramètre b. Les liens avec les teneurs en eau aux potentiels caractéristiques ne sont pas significatifs.

Propriétés hydrodynamiques

Les propriétés hydrodynamiques mesurées sont la conductivité hydraulique à saturation ($K_{S.}$) et au potentiel de $-1 \text{ cm} (K_{-1 \text{ cm}})$. Ces deux propriétés sont (logiquement) très corrélées ($r_{s} = 0.93$), puisque $K_{s.} = K_{-1 \text{ cm}}$ quand $h_{A} < -1 \text{ cm}$.

	Limon (ND)	E.G. tot.	CaCO ₃	C _{ORG.}	Profond.
K _{-1cm}	(-0,31)	(0,31)	0,40	0,32	(-0,37)
K _{S.}	-0,38	0,35	0,47	0,34	-0,32

tableau 63 – Corrélations des propriétés de conductivité hydraulique avec les propriétés agro-pédologiques.

Le tableau 63 des corrélations fait apparaître que les conductivités élevées sont associées à des teneurs en limon plus faibles, à des teneurs en éléments grossiers, en CaCO₃ ou en matière organique plus importantes. Mais ces corrélations restent faibles,

	$\theta_{SAT.}$	R.U.	h _A	ʻb'	
K _{-1cm}	0,37	(0,28)	0,44	(0,24)	
Ksat	0.46	-0.38	0.55	(0,30)	

si l'on excepte le r_s de 0,47 entre K_s et la teneur en CaCO₃.

tableau 64 – Corrélations des propriétés hydrauliques avec les propriétés de rétention en eau.

Les liens avec les autres propriétés hydriques ne sont pas très marqués non plus. On notera que les conductivités élevées sont associées à une teneur en eau à saturation ou un potentiel au point d'entrée d'air élevé, mais à une réserve utile plus faible.

Fraction d'eau immobile (pour h = -1 cm)

La fraction d'eau immobile mesurée au potentiel de -1 cm n'est significativement corrélée qu'avec un faible nombre de propriétés. Elle est notamment **corrélée avec la teneur en eau à saturation** ($r_s = -0.48$; une teneur en eau à saturation élevée correspond à une fraction d'eau immobile faible), **avec la teneur en eau à** pF 2 ($r_s = 0.43$; une teneur en eau à pF 2 élevée correspond à une fraction d'eau immobile élevée), **et avec la masse volumique apparente** ($r_s = 0.44$; une masse volumique apparente élevée correspond à une fraction d'eau immobile élevée). La fraction d'eau immobile n'est pas du tout corrélée à la teneur en eau à pF 4,2, ni à la réserve utile. Ces résultats suggèrent que la partie non-mobile de la porosité du sol remplie entre la saturation et la capacité au champ pourraient être, dans le secteur étudié, essentiellement mobile.

La fraction d'eau immobile est aussi négativement corrélée à plusieurs paramètres mesurés lors de l'infiltration ayant précédé l'apport de traceur. La fraction d'eau immobile est ainsi corrélée au flux en régime permanent ($r_s = -0.58$), à la sorptivité ($r_s = -0.48$) et à la conductivité hydraulique à saturation ($r_s = -0.39$), mais pas significativement à la conductivité à -1 cm.

La première hypothèse soulevée par ce résultat est que les sols à forte conductivité hydraulique au voisinage de la saturation ont une teneur en eau immobile faible (probablement du fait d'une 'connectivité' plus importante de la porosité). La deuxième est que la fraction d'eau immobile mesure en fait un effet cinétique du flux d'eau sur la répartition du traceur dans la phase liquide du sol (préalablement remplie sous l'effet de la sorptivité et de la gravité), reflétant une partie de la phase liquide 'beaucoup moins mobile' plutôt qu'une partie réellement immobile. Le lien négatif entre la sorptivité et la fraction d'eau immobile est un peu en contradiction avec le fait que, sous le disque, les effets gravitaires dominent théoriquement. En effet, la sorptivité n'est plus sensée agir au moment où le traceur est appliqué. On peut émettre l'hypothèse que la sorptivité est plus fortement influencée par (et donc positivement corrélée à) une fraction de la porosité du sol qui se sature par capillarité mais contribue peu (et donc négativement corrélée) au mouvement d'eau au voisinage de la saturation.

La fraction d'eau immobile n'est significativement corrélée à aucune des fractions granulométriques du sol, fines, grossières ou carbonatées, ni à la teneur en matière organique.

	Limon (ND)	E.G. tot.	C _{ORG.}	C sur N	max(E.G. Ca)
K _D	(0,05)	(0,00)	0,55	0,59	-0,45
K _{OC}	0,51	-0,40	(-0,31)	(0,20)	(-0,17)

Adsorption de l'isoproturon sur les sols : K_D & K_{OC}

tableau 65 – Corrélations des propriétés d'adsorption $K_D \& K_{OC}$.

Le coefficient de corrélation de Pearson entre le K_D et le Carbone organique C_{ORG} est de 0,67.

Le coefficient d'adsorption linéaire (K_D) est positivement corrélé avec la matière organique, ce qui va dans le sens des données de la littérature pour l'isoproturon (comme pour beaucoup de molécules phytosanitaires). Il est cependant relativement faible comparé aux coefficients de la littérature (même en prenant le r de Pearson).

Dégradation et minéralisation de l'isoproturon dans les sols (DT₅₀)

	Argile (D).	E.G. tot.	C _{ORG.}	Profond.	K _{OC}
DT ₅₀ dégr.	-0,33	-0,33	-0,46	0,33	(0,25)
DT_{50} min.	-0,52	-0,41	-0,55	0,51	0,48
diffDT ₅₀	-0,33	-0,33	0,40	0,23	0,54

tableau 66 – Corrélations des propriétés de dégradation et de minéralisation de l'isoproturon.

La propriété diff DT_{50} est la différence entre la valeur minimale de la DT_{50} et la valeur maximale de DT_{50} obtenue par la méthode MAPE% (optimums locaux), la DT_{50} de dégradation finale étant le résultat présentant la plus faible erreur d'ajustement (optimum global). Plus la diff DT_{50} est élevée, plus l'aspect biphasique de la cinétique de dégradation est accentué.

La demi-vie de dégradation de l'isoproturon, évaluée par ajustement direct sur la MAPE%, est corrélée avec plusieurs propriétés agronomiques, pédologiques ou physico-chimiques. Ces corrélations sont généralement assez faibles ($r_s \le 0.47$; $P \ge 0.001$). La demi-vie de minéralisation de l'isoproturon est un peu mieux corrélée à ces propriétés.

La demi-vie de dégradation de l'isoproturon est essentiellement corrélée à la teneur en carbone organique ($r_s = -0,46$) et de manière identique au C/N. Une teneur en carbone organique élevée tend à être associée à une DT_{50} faible.

On peut supposer que la teneur élevée en carbone organique reflète une microflore dégradante plus importante. Il est aussi possible que les teneurs en carbone organique accentuent l'aspect biphasique des cinétiques de dégradation. L'ajustement direct des cinétiques de dégradation privilégie souvent, dans le travail présenté ici, la première partie de la courbe - notamment quand elles sont fortement biphasiques et ont une teneur en isoproturon à 90 jours faible - ce qui tend à réduire la demi-vie.

La demi-vie de minéralisation est aussi corrélée au carbone organique ($r_s = -0.55$), mais aussi à la teneur en argile ($r_s = -0.52$). Plus le sol est argileux et/ou riche en carbone organique, plus la demi-vie de minéralisation est faible. De même, les sols plus profonds sont associés à une demi-vie de minéralisation plus élevée ($r_s = 0.51$). Ces trois corrélations sont cohérentes avec les relations constatées entre teneurs en argile, carbone organique et profondeur du sol. Le K_{OC} est aussi négativement corrélé avec la demi-vie de minéralisation. Un K_{OC} élevé correspond souvent à une demi-vie faible.

La différence entre les deux optimums locaux d'ajustement de la cinétique de dégradation (diff $DT_{50} = DT_{50} max - DT_{50} min$) reflète l'aspect biphasique (ou monophasique) de la cinétique. Une différence importante montre que la courbe est fortement biphasique (bi-exponentielle). Ce paramètre est bien corrélé au K_{OC} : plus le K_{OC} est élevé, plus la courbe est biphasique.

Un K_{OC} plus élevé peut être dû à une matière organique plus réactive vis-à-vis de l'isoproturon (à quantité égale) et/ou une phase solide du sol plus réactive vis-à-vis de la molécule. On peut émettre l'hypothèse que la réactivité de la phase solide ou de la phase organique influence aussi la cinétique de dégradation (peut être par des effets d'immobilisation du pesticide ou de ses métabolites, qui deviennent alors non-extractibles).

4.3 Approche graphique des covariations avec la texture de surface

La combinaison d'un triangle des textures et de graphiques du type 'à bulles' permet d'examiner visuellement les relations (ou l'absence de relation) entre les trois fractions granulométriques et d'autres propriétés importantes. Le principe de ces graphiques est de positionner une observation sur un triangle des textures (à 3 axes), puis de rendre la taille du point ainsi placé proportionnelle à une quatrième propriété. Un gros point correspond à une valeur importante de la 4^e propriété, un petit à une valeur faible de la 4^e propriété. Afin de rendre le graphique plus lisible et de limiter le 'masquage' de points par d'autres, ceux ci sont tracés par ordre décroissant sur la 4^e propriété (les valeurs fortes – gros points – sont placées les premières, puis par-dessus ces dernières sont placées les valeurs plus faibles), et un dégradé de couleur est appliqué, ce qui permet de contraster les points de taille différente superposés.





Pour la 4^e propriété (A : teneur en CaCO₃; B : teneur en graviers), plus la taille du point est importante et plus la couleur est claire, plus la valeur est élevée (A : taille min = 0,0 %; max = 15,3 %; B: taille min = 0,0 %; max = 2,9 %).





Ces graphiques sont des agrandissements du triangle des textures présenté à la figure 37, p. 150. Pour la 4^e propriété (A : teneur en carbone organique ; B : K_{OC}), plus la taille du point est importante & plus la couleur est claire, plus la valeur est élevée (A : taille min = 1.1 % ; max = 2,2 %; B: taille min = 55 L.kg⁻¹ ; max = 120 L.kg⁻¹).

La figure 84 montre assez clairement l'existence de deux groupes de sol pour la teneur en $CaCO_3$: les sols contenant plus de $CaCO_3$ appartiennent tous à la classe de texture 'AL' (sols dont la teneur en argile est \geq à 30%), et contiennent éventuellement une fraction sableuse plus importante. À quelques exceptions près, les sols avec une fraction de $CaCO_3$ faible ou nulle appartiennent à la classe de texture 'LA'.

La même segmentation semble pouvoir s'appliquer à la teneur en graviers, mais l'effet est moins net : il existe des sols appartenant à la classe de texture 'LA' contenant des graviers et des sols de la classe 'AL' qui en contiennent peu. La présence éventuelle de graviers quartzeux du Burdigalien, et éventuellement de meulière peut expliquer cette segmentation moins nette (l'un et l'autre ne sont pas altérés sous les climats tempérés, contrairement au calcaire).

La figure 85-A semble indiquer que les sols appartenant à la classe texturale AL tendent à être plus organiques, mais l'effet est peu prononcé. Les variations de teneur en carbone organique liées aux pratiques agronomiques 'masquent' très certainement les effets liés à la texture du sol.

La partie droite de la figure (B) indique par contre que les sols de texture 'AL' ont un K_{OC} plus faible que les sols de texture 'LA', même si certains sols de texture 'LA' ont un K_{OC} faible. Ce résultat est concordant avec les corrélations positives du K_{OC} avec la teneur en limon total ou négatives avec la teneur en éléments grossiers.

Afin de détailler ces relations, la propriété qualitative 'Classe de texture' a été introduite dans les tests d'analyse de la variance.

4.4 Importance des propriétés agro-pédologiques qualitatives : analyses de la variance

L'analyse de la variance permet d'explorer les liens qui existent entre une propriété mesurée de manière quantitative et d'autres propriétés exprimées de manière qualitative. Ces dernières peuvent être importantes, et ni l'étude des corrélations, ni les analyses en composantes principales ne permettent de prendre en compte ce type d'association.

La présentation des résultats d'analyse de la variance a été séparée en 2 catégories, suivant le nombre de 'facteurs contrôlés' (propriétés qualitatives) étudiés simultanément. Les analyses de la variance à un facteur contrôlé ont été réalisées avec le test non paramétrique de Kruskal-Wallis, tandis que les analyses à plus d'un facteur contrôlé ont été réalisées avec une analyse de la variance plus classique de Fisher (test paramétrique, à défaut de disposer d'un test non paramétrique pour les analyses de variance à plusieurs facteurs contrôlés).

■ Analyses de la variance à un facteur contrôlé

□ Seuillage de propriétés quantitatives

Il peut être intéressant de transformer des propriétés pédologiques quantitatives en propriétés qualitatives afin d'essayer de mettre en évidence les effets de ces dernières sur les propriétés d'intérêt (DT_{50} , K_D , $K_{S.}$, *etc.*). La stratégie retenue consiste à choisir un seuil permettant de segmenter les valeurs de la propriété pédologique quantitative en 2 classes distinctes (transformation en propriété binaire). Les propriétés ainsi traitées sont le pH, la teneur en CaCO₃ et la teneur en éléments grossiers. Le pH a été scindé en deux classes $pH \ge 7$ ou pH < 7; la teneur en CaCO₃ a été scindée en deux classes $[CaCO_3] \ge 4$ $g.kg^{-1}$ ou $[CaCO_3] < 4$ $g.kg^{-1}$ ou [E.G. tot.] < 40 $g.kg^{-1}$.

Le choix du seuil de valeur permettant de créer deux classes à partir d'une propriété quantitative a été effectué d'abord par des tests systématiques (non décrits ici), puis déterminé et arrondi 'empiriquement' (= choix de l'opérateur).

De la même manière, il a été choisi de créer une propriété 'type de sol' simplifiée, en deux classes, avec d'un côté (i) les sols à ambiance carbonatée (sols à effervescence notable à HCl et/ou ayant une réserve de carbonates sous forme d'éléments grossiers : CALCISOLS ou RENDOSOLS, et de l'autre (ii) les sols à ambiance non carbonatée). Ce choix résulte d'une logique pédologique évidente, et il a été confirmé par des tests visant à tester systématiquement la pertinence des regroupements possibles de certaines des 6 classes de sols initiales afin d'aboutir à 2 groupes (ou en un nombre de groupes inférieur ou égal à 5).

Effets des propriétés agronomiques et pédologiques qualitatives sur la masse volumique apparente et la teneur en matière organique du sol

La teneur en carbone organique et la masse volumique apparente sont deux propriétés importantes du sol influencées conjointement par les pratiques agronomiques et les propriétés plus stables du sol. Les analyses de la variance permettent de déterminer le degré d'association de ces propriétés avec les propriétés agro-pédologiques qualitatives.

Le tableau 67 ci-dessous montre que la teneur en carbone organique est influencée par le type de travail du sol et la classe de texture. Il est probable que la stratification verticale (lit de semence, reste de l'horizon travaillé) ait un effet sur le carbone organique, mais celui ci n'est pas significatif (test non paramétrique) ou peu significatif (test paramétrique).

Pour la masse volumique apparente, les effets de la stratification verticale et du

travail du sol ont un effet très significatif. L'effet de la classe de texture sur la masse volumique n'est pas significatif.

	Couche	Travail	Type R.P.	Classe text.
Carbone org.	0,10239 ^{NB}	0,02005 *	0,11006	0,00040***
Mass. vol. app.	0,00410 **	0,00562 **	0,10008	0,06251 °

tableau 67 – Analyse de la variance à un facteur contrôlé : effet des propriétés qualitatives sur le carbone organique et la masse volumique apparente.

Méthode non-paramétrique de Kruskal-Wallis. Le tableau indique la probabilité P de l'absence d'effet de la propriété qualitative (en colonne) sur la propriété quantitative (en ligne), et sa significativité. Symboles suivant le P : '***' si $0 < P \le 0,001$; '**' si $0,001 < P \le 0,01$; '*' si $0,01 < P \le 0,05$; '°' si $0,05 < P \le 0,1$; '' si P > 0,1). Les valeurs de P au-dessus de 0,05 ne sont pas considérées comme révélant un effet significatif. **Couche** : effet couche de sol (lit de semence <u>vs</u> reste de l'horizon travaillé); **Travail** : modalité de travail du sol (avec labour <u>vs</u> sans labour) ; **Type R.P.** : type pédologique selon le Référentiel Pédologique, 6 classes identifiées ; **Classe text.** : Classe de texture, d'après le triangle de l'Aisne, 2 classes identifiées ; **Carbone org.** : teneur en carbone organique ; **Mass. vol app.** : masse volumique apparente.

NB : L'effet 'couche de sol' est tout juste significative avec une analyse de la variance de Fisher avec P = 0.04409 *.

Les deux tableaux ci-dessous illustrent le sens des effets mis en évidence :

		Co	ouche	Travail		
		Lit de sem.	Reste horiz.	Convent.	Simplifié	
		<i>n</i> = 34	<i>n</i> = 16	<i>n</i> = 32	<i>n</i> = 18	
Carbone org.	[g.kg ⁻¹]	13,0	12,1	12,1	14,5	
Mass. vol. app.	$[g.cm^{-3}]$	1,2	1,4	1,2	1,3	

tableau 68 – Valeurs médianes de la teneur en carbone organique ou de la masse volumique apparente selon la couche de sol considérée ou selon le type de travail du sol.

'Lit de sem.': Lit de semence ; 'Reste horiz.' : reste de l'horizon travaillé, hors lit de semence ; 'Convent.' : travail conventionnel, avec labour ; 'Simplifié' : travail simplifié du sol, sans labour ; les effectifs indiqués (n) sont le nombre d'échantillons, et non le nombre de sites.

La teneur en carbone organique est plus élevée dans le lit de semence, et en situation de travail du sol simplifié. La masse volumique apparente est plus élevée dans la partie de l'horizon travaillé qui n'a pas été semée, et dans les parcelles en travail simplifié.

	Classe de texture.					
		'AL' 'LA'				
	n =	<i>n</i> = 13	<i>n</i> = 37			
Carbone org.	[g.kg ⁻¹]	15,3	11,8			
Mass. vol. app.	$[g.cm^{-3}]$	12,23	12,26			

tableau 69 – Valeurs médianes de la teneur en carbone organique ou de la masse volumique apparente selon la classe de texture.

'AL' : texture argilo-limoneuse ; 'LA' : texture limono-argileuse ; les effectifs indiqués (n) sont le nombre d'échantillons, et non le nombre de sites.

La classe de texture AL présente des échantillons plus organiques, mais n'a pas d'effet sur la masse volumique apparente.

Les propriétés / variables qui ont été simplifiées en propriétés binaires (type pédologique simplifié, classe de pH, classe de teneur en CaCO₃ ou de teneur en éléments grossiers) peuvent aussi avoir un effet sur la teneur en carbone organique ou la masse volumique apparente.

J. Woeys Partie IV	J.	Moeys	Partie IV
----------------------	----	-------	-----------

	Type RP (2)	Cl. pH	Cl. CaCO ₃	Cl. E.G.
Carbone org.	0,01283 *	0,00806 **	0,00118 **	0,00313 **
Mass. vol. app.	0,06251 °	0,05376 °	0,50298	0,28569

tableau 70 – Analyse de la variance avec les propriétés qualitatives 'dérivées' : effet sur la teneur en carbone organique ou la masse volumique apparente.

Pour une explication des différents seuils de la probabilité P et des symboles associés se référer au tableau 67 p. 212. **Type RP (2)** : classification du référentiel pédologique simplifiée en 2 classes (sols à ambiance carbonatée ou non) ; **Cl. pH** : 2 classes de pH (acide <u>vs</u> neutre à basique) ; **Cl. CaCO**₃ : 2 classes de teneurs en CaCO₃ (teneurs faibles <u>vs</u> teneurs élevées) ; **Cl. E.G.** : 2 classes de teneurs en éléments grossiers (teneurs faibles <u>vs</u> teneurs élevées) ; **Carbone org.** : teneur en carbone organique ; **Mass. vol. app.** : Masse volumique apparente.

Les 4 propriétés quantitatives (binaires) testées ont un effet significatif à très significatif sur la teneur en carbone organique. Ainsi, les sols avec un pH, une teneur en $CaCO_3$ ou en éléments grossiers plus élevée, ont une teneur en carbone organique plus importante. Le turnover du carbone est en effet plus lent quand le sol est carbonaté, d'où un stock de matières organiques un peu supérieur.

	_	Туре	e RP (2)	Cl. pl	Н
		{R.,C.}	{B.,P.,N.,L.}	pH < 7	$pH \ge 7$
		<i>n</i> = 12	n = 38	n = 19	<i>n</i> = 31
Carbone org.	$[g.kg^{-1}]$	15,2	12,1	11,7	13,1

tableau 71 – Valeurs médianes de la teneur en carbone organique selon le type pédologique de sol simplifié ou selon la classe de pH.

'R.': RENDOSOL; 'C.': CALCISOL; 'B.': BRUNISOL; 'P.': PSEUDO-LUVISOLS; 'N.': NÉOLUVISOLS; 'L.': LUVISOLS;

La teneur en carbone organique est supérieure pour les types de sol carbonatés, et pour les sols dont le pH est supérieur à 7.

	-	Cl. Ca	aCO ₃	Cl	. E.G.
		$< 4 \text{ g.kg}^{-1} \ge 4 \text{ g.kg}^{-1}$		$< 40 \text{ g.kg}^{-1}$	\geq 40 g.kg ⁻¹
		n = 36	n = 14	n = 38	n = 12
Carbone org.	[g.kg ⁻¹]	11,8	15,2	12,0	15,3

tableau 72 – Valeurs médianes de la teneur en carbone organique selon la classe de teneur en $CaCO_3$ ou la classe de teneur en éléments grossiers.

La teneur en carbone organique est plus élevée pour les sols à teneur plus élevée en CaCO₃ ou en éléments grossiers.

Il ressort de ces analyses que la valeur de la masse volumique apparente dépend de la couche de sol considérée (lit de semence / reste de l'horizon travaillé), ce qui est logique et, dans une moindre mesure, par la modalité de travail du sol (conventionnel / sans labour).

La teneur en carbone organique varie selon la classe de texture, le pH, la teneur en CaCO₃ et en éléments grossiers, et dans une moindre mesure par le type pédologique (simplifié) et la modalité de travail du sol.

Effets des propriétés agronomiques et pédologiques
qualitatives sur les propriétés hydriques du sol et sur les
interactions sol-isoproturon

_ _ _

	Couche	Travail	Type R.P.	Classe text.
Frac. Im.	0,00360 *	0,68605	0,25820	0,12976
$\theta_{S.}$	0,00483 *	0,80836	0,77810	0,08252 °
θ(pF 2)	0,00175 *	0,05484 *	0,51037	0,58029
θ(pF 4,2)	0,00001 **	0,12449	0,55398	0,00098 **
R.U.	0,13970	0,33187	0,06059 °	0,00035 **
h _A	0,03218 *	0,18222	0,33993	0,00236 *
'b'	0,00127 *	0,98387	0,05979 °	0,00009***
K _{S.}	0,05059 °	0,15129	0,37325	0,00139 *
K _D	0,08432 °	0,11491	0,18404	0,58790
K _{OC}	0,70814	0,85566	0,03543 *	0,00150 *
DT ₅₀ dégr.	0,59535	0,04509 *	0,32011	0,06600 °

tableau 73 – Analyse de la variance à un facteur contrôlé : effet des propriétés qualificatives sur les propriétés hydriques du sol et les interactions sol-isoproturon.

Pour une explication des différents seuils de la probabilité P et des symboles associés se référer au tableau 67 p. 212.

La couche de sol (lit de semence ou reste de l'horizon travaillé) parait avoir une importance pour de nombreuses propriétés : la fraction d'eau immobile, les teneurs en eau à saturation, à pF 2 et 4,2 (très significativement pour ce dernier), mais aussi les paramètres de Campbell b et h_A .

Le travail du sol n'a une importance significative que pour peu de propriétés du sol : la teneur en eau au pF 2 ou la DT_{50} de dégradation de l'isoproturon.

Le type pédologique (en 6 classes) n'est lié qu'au K_{oc}.

La classe de texture est significativement liée à la teneur en eau à pF 4,2, à la réserve utile de l'horizon et aux paramètres b et h_A . La classe de texture est aussi la seule propriété qualitative liée à la conductivité hydraulique à saturation.

		Со	uche	Trav	/ail
		Lit de sem.	Reste horiz.	Convent.	Simplifié
		<i>n</i> = 34	<i>n</i> = 16	n = 32	n = 18
Frac. Im.	[%]	36	79	n.s.	n.s.
$\theta_{SAT.}$	[%]	48	44	n.s.	n.s.
θ(pF 2)	[%]	32	35	32	34
θ(pF 4,2)	[%]	17	21	n.s.	n.s.
h _A	[cm]	-0,05	-0,13	n.s.	n.s.
'b'	[-]	7,7	10,4	n.s.	n.s.
K _{SAT.}	[m.s-1]	0,02	0,01	n.s.	n.s.
K _D	[L.kg-1]	1,11	0,97	n.s.	n.s.
DT ₅₀ dégr.	[j]	n.s.	n.s.	7,5	4,7

tableau 74 – Valeur médiane des propriétés bio-physico-chimiques testées selon la couche de sol considérée ou selon le type de travail du sol.

'Lit de sem.' : Lit de semence ; 'Reste horiz.' : reste de l'horizon travaillé, hors lit de semence ; 'Convent.' : travail conventionnel, avec labour ; 'Simplifié' : travail simplifié du sol, sans labour ; 'n.s.' analyse de la variance non significative et non 'limites' (P > 0,1), les valeurs de la propriété ne sont pas présentées. Les effectifs indiqués (n) sont le nombre d'échantillons, et non le nombre de sites.

J. Moeys | Partie IV

Le tableau 74 montre que les lits de semence ont en moyenne une fraction d'eau immobile plus basse que le reste de l'horizon travaillé, une teneur en eau à saturation légèrement plus élevée, mais des teneurs en eau aux pF2 et 4,2 plus basses. Ils ont aussi une conductivité hydraulique à saturation plus élevée, et le K_D de l'isoproturon y est un peu plus élevé.

Les sols en travail du simplifié ont une demi-vie de l'isoproturon plus basse que les sols en travail conventionnel.

	Type R.P. (non simplifié)				Classe	text.			
		R.	C.	B.	P.	N.	L.	'AL'	'LA'
	n =	1	11	17	4	16	1	n = 13	n = 37
$\theta_{SAT.}$	[%]	n.s.	n.s.	n.s.	n.s.	n.s.	n.s.	48 %	45 %
θ(pF 4,2)	[%]	n.s.	n.s.	n.s.	n.s.	n.s.	n.s.	20 %	17 %
R.U.	[%]	11%	14%	15%	13%	17%	19%	13 %	17 %
h _A	[-]	n.s.	n.s.	n.s.	n.s.	n.s.	n.s.	-0,02	-0,10
'b'	[-]	11,6	8,8	7,5	9,0	7,6	6,2	11,0	7,6
K _{SAT.}	$[m.s^{-1}]$	n.s.	n.s.	n.s.	n.s.	n.s.	n.s.	0,04	0,01
K _{OC}	$[L.kg^{-1}]$	55	67	83	88	83	65	74	83
DT ₅₀ dégr.	[j]	n.s.	n.s.	n.s.	n.s.	n.s.	n.s.	5,0	7,3

tableau 75 – Valeur médiane des propriétés bio-physico-chimiques testées selon le type pédologique de sol ou selon la classe de texture.

'AL': texture argilo-limoneuse; 'LA': texture limono-argileuse; 'R.': Rendosol; 'C.': Calcisol; 'B.': BRUNISOL; 'P.': PSEUDO-LUVISOLS; 'N.': Néoluvisols; 'L.': Luvisols; 'n.s.' analyse de la variance non significative et non 'limites' (P > 0,1), les valeurs de la propriété ne sont pas présentées. Les effectifs indiqués (n) sont le nombre d'échantillons, et non le nombre de sites.

Sur le tableau 75, on peut voir que l'effet du type de sol sur le K_{OC} semble se segmenter en fonction des types de sols calcaires et des autres (les premiers ayant un K_{OC} plus bas), mais les LUVISOLS font exception à cette règle.

Les effets de la classe de texture sont plus clairs, avec une réserve utile plus basse et une conductivité hydraulique à saturation plus élevée pour les sols argilo-limoneux.

	Type RP (2)	Cl. pH	Cl. CaCO ₃	Cl. E.G.
Frac. Im.	0,13981	0,02330 *	0,06627 °	0,01707 *
$\theta_{S.}$	0,35167	0,00254 *	0,06162 °	0,00961 **
θ(pF 2)	0,71626	0,18051	0,65000	0,21151
θ(pF 4,2)	0,20330	0,39005	0,00075 **	0,14596
R.U.	0,06912 °	0,01394 *	0,00054 **	0,09720 °
h _A	0,19539	0,00164 *	0,00267 *	0,00234 **
'b'	0,03093 *	0,01146 *	0,00011 **	0,06918 *
K _{S.}	0,04561 *	0,00021 **	0,01078 *	0,00023 **
K _D	0,75047	0,21900	0,66564	0,89159
K _{OC}	0,00392 *	0,22658	0,00008***	0,00271 **
DT ₅₀ dégr.	0,09910 °	0,20019	0,07080 °	0,02734 *

tableau 76 – Analyse de la variance avec les propriétés qualitatives 'dérivées' : effet sur les propriétés hydriques du sol et les interactions sol-isoproturon

Pour une explication des différents seuils de la probabilité P et des symboles associés se référer au tableau 67 p. 212. **Type RP (2)** : classification du référentiel pédologique simplifiée en 2 classes (sols à ambiance carbonatée ou non) ; **Cl. pH** : 2 classes de pH (acide <u>vs</u> neutre à basique) ; **Cl. CaCO**₃ : 2 classes de teneurs en **CaCO**₃ (teneurs faibles <u>vs</u> teneurs élevées) ; **Cl. E.G.** : 2 classes de teneurs en éléments grossiers (teneurs faibles <u>vs</u> teneurs élevées).

Le tableau 76 montre les effets des propriétés qualitatives 'dérivées'. L'utilisation du
'type de sol simplifié', en 2 classes, permet d'améliorer les résultats de l'analyse de la variance pour le K_{OC} et révèle un effet sur la conductivité hydraulique à saturation et sur le paramètre b de la fonction de rétention en eau de Campbell.

La classe de pH est liée à la fraction d'eau immobile, à la teneur en eau à saturation, à la réserve utile et à la conductivité hydraulique à saturation.

La classe de teneur en $CaCO_3$ est liée à la teneur en eau à pF 4,2, à la réserve utile et à la conductivité hydraulique à saturation. Elle a aussi un effet très significatif sur le K_{OC} .

La classe de teneur en éléments grossiers joue sur la fraction d'eau immobile, la teneur en eau à saturation et la conductivité hydraulique à saturation. Cette propriété est aussi liée au K_{OC} et à la DT_{50} du pesticide.

On notera que, sur l'ensemble des propriétés qualitatives testées, le K_D n'est influencé significativement par aucune d'entre elles.

		Type RP (2)		C	Cl. pH
		{R.,C.}	{B.,P.,N.,L.}	pH < 7	$pH \ge 7$
		<i>n</i> = 12	<i>n</i> = 38	<i>n</i> = 19	<i>n</i> = 31
Frac. Im.	[%]	n.s.	n.s.	74	36
$\theta_{S.}$	[%]	n.s.	n.s.	44	48
R.U.	[%]	13	16	17	14
h _A	[-]	n.s.	n.s.	-0,17	-0,05
'b'	[-]	9,2	7,7	7,2	8,6
K _{S.}	$[mm.s^{-1}]$	0,03	0,01	0,01	0,03
K _{OC}	$[L.kg^{-1}]$	66	83	n.s.	n.s.
DT ₅₀ dégr.	[j]	5,3	7,3	n.s.	n.s.

tableau 77 – Valeur médiane des propriétés quantitatives testées selon le type pédologique de sol simplifié ou selon la classe de pH.

n.s. : analyse de la variance non significative et non 'limites' (P > 0,1).

Le tableau 77 révèle que la fraction d'eau immobile et la réserve utile sont plus importantes dans les échantillons dont le pH est inférieur à 7.

La conductivité hydraulique à saturation est plus élevée dans les sols à ambiance carbonatée et de la même manière dans les sols dont le pH est supérieur à 7.

Le K_{OC} de l'isoproturon est plus élevé dans les sols à ambiance non carbonatée.

		Cl. Ca	Cl. CaCO ₃		. E.G.	
		$< 4 \text{ g.kg}^{-1}$	\geq 4 g.kg ⁻¹	$< 40 \text{ g.kg}^{-1}$	\geq 40 g.kg ⁻¹	
		n = 36	n = 14	n = 38	n = 12	
Frac. Im.	[%]	56	32	59	31	
$\theta_{S.}$	[%]	45	48	45	48	
θ(pF 4,2)	[%]	17	20	n.s.	n.s.	
R.U.	[%]	17	13	15	13	
h _A	[-]	-0,11	-0,03	-0,11	-0,02	
'b'	[-]	7,6	10,6	7,7	9,2	
K _{S.}	$[\text{mm.s}^{-1}]$	0,01	0,03	0,01	0,05	
K _{OC}	$[L.kg^{-1}]$	84	68	83	70	
DT ₅₀ dégr.	[j]	7,5	5,0	7,5	5,0	

tableau 78 – Valeur médiane des propriétés quantitatives testées selon le type pédologique de sol simplifié ou selon la classe de pH.

n.s. : analyse de la variance non significative et non 'limites' (P > 0, 1).

On voit sur le tableau 78 que les effets de la classe de teneur en CaCO3 et ceux de

la classe de teneur en éléments grossiers vont dans le même sens, avec des effets similaires entre les échantillons dont la teneur en $CaCO_3$ est supérieure à 4 g.kg⁻¹ et/ou ceux dont la teneur en éléments grossiers est supérieure à 40 g.kg⁻¹. Cette catégorie d'échantillons a une fraction d'eau immobile inférieure, une teneur en eau à saturation supérieure mais une réserve utile inférieure. Ces sols carbonatés / caillouteux ont aussi une conductivité hydraulique à saturation plus élevée, une DT_{50} de l'isoproturon inférieure.

Le type de **couche de sol** est un facteur assez important, et parfois important pour expliquer certaines **propriétés hydriques du sol**, notamment (et de manière surprenante) la teneur en eau au point de flétrissement permanent. Cette relation est incertaine pour K_s et absente pour la réserve utile.

Le mode de travail du sol n'est un facteur important que pour la DT_{50} de dégradation de l'isoproturon et la teneur en eau à la capacité au champ.

Le type de couche de sol et le mode de travail du sol étant des éléments importants pour la structuration de la couche de sol concernée, il est surprenant que les effets ne soient pas plus marqués sur les propriétés hydriques.

La **classe de texture** est un facteur important pour le paramètre b de Campbell, pour la teneur en eau au point de flétrissement permanent, et dans une moindre mesure pour la réserve utile, la conductivité à saturation, le paramètre h_A de Campbell et le K_{OC} de l'isoproturon. Le **type pédologique simplifié** influence b, K_S et le K_{OC} .

Le **pH**, la teneur en CaCO₃ et en éléments grossiers influencent la plupart des propriétés hydriques (mais ce n'est pas systématique), à l'exception de la teneur en eau à la capacité au champ. Le K_{OC} est lié aux teneurs en CaCO₃ et en éléments grossiers, tandis que la DT_{50} ne paraît influencée que par la teneur en éléments grossiers.

Dans la littérature, outre la masse volumique apparente du sol, la granulométrie est généralement citée comme facteur explicatif des propriétés hydriques du sol. Les corrélations ont montré que certaines propriétés hydriques sont (bien) liées aux teneurs en limon et en CaCO₃ (mais pas toujours). L'analyse de la variance apporte un éclairage supplémentaire sur les déterminismes des propriétés hydriques, mais les résultats ne sont pas nets.

Les propriétés pédologiques semblent avoir un effet sur le K_{OC} , notamment les teneurs en éléments grossiers et en $CaCO_3$. **Ce constat** complète l'effet modéré de la teneur en limon sur le K_{OC} observé par les corrélations, mais **ne fait pas ressortir de déterminismes majeurs**.

Le constat est le même pour la DT_{50} (peu de facteurs explicatifs, liens ténus), ce qui aggrave le fait que la propriété ne soit corrélée qu'à la teneur en carbone organique.

■ Analyses de la variance à plusieurs facteurs contrôlés

Les analyses de la variance à deux facteurs contrôlés ont été réalisées avec la méthode paramétrique de Fisher. Les résultats sont plus délicats à interpréter qu'avec le test de Kruskal-Wallis, car les propriétés quantitatives étudiées s'écartent parfois de la normalité, l'égalité des variances n'est pas toujours respectée et la taille des différents groupes d'échantillons distingués par le croisement des facteurs n'est jamais équilibrée.

La teneur en carbone organique est influencée conjointement par la modalité de travail du sol et la stratification verticale de l'horizon labouré (P = 0.000035 ***).

C _{ORG.}	$[g.kg^{-1}]$	Couche		
		Lit de sem.	Reste horiz.	
Travail	Convent.	11,9	12,4	
	Simplifié	16,7	11,9	

tableau 79 – Valeurs médianes de la teneur en carbone organique pour les différents groupes d'échantillons {travail du sol ; couche}.

Le tableau 79 montre que les échantillons provenant du lit de semence des parcelles en travail simplifié sont nettement plus organiques que les autres.

Par contre les différences sont moins marquées entre le lit de semence et le reste de l'horizon de surface en travail conventionnel. De même, la différence de teneur en carbone organique du reste de l'horizon travaillé est faible entre les modalités travail simplifié et conventionnel.

L'effet conjoint du mode de travail du sol et de la stratification verticale de l'horizon travaillé sur la masse volumique apparente est moins important mais significatif (P = 0.0118289 *) :

ρ_b	[kg.dm ⁻³]	Couche		
	-	Lit de sem.	Reste horiz.	
Travail	Convent.	1,23	1,24	
	Simplifié	1,26	1,48	

tableau 80 – Valeurs médianes de la masse volumique apparente ρ_b pour les différents groupes d'échantillons {travail du sol ; couche}.

Le tableau 80 fait apparaître des différences moins tranchées pour la masse volumique que ne le laisse penser le résultat de l'analyse de la variance. La principale différence de masse volumique est la masse volumique apparente nettement plus élevée de l'horizon travaillé, hors lit de semence, en travail du sol simplifié (1,48 kg.dm⁻³). Quelle que soit la modalité de travail du sol, les lits de semence sont moins denses que le reste de l'horizon travaillé. La différence réelle est probablement plus accentuée, du fait de la difficulté à réaliser un prélèvement de masse volumique correct dans les zones les plus meubles du lit de semence, ce qui a pu biaiser la représentativité de l'échantillonnage.

Le K_D semble aussi influencé conjointement par le travail du sol et la couche de sol de l'horizon labouré (P = 0,001755 **). On note aussi une influence croisée du travail du sol et de la classe de teneur en CaCO₃ sur ce dernier (P = 0,01284 *).

K _D	$[L.kg^{-1}]$	Couche		Cl. C	aCO ₃
	-	Lit de sem.	Reste horiz.	$< 4 \text{ g.kg}^{-1}$	\geq 4 g.kg ⁻¹
Travail	Convent.	1,06	1,03	1,01	1,18
	Simplifié	1,39	0,94	1,29	0,97

Le tableau 81 montre que le partitionnement vertical de l'horizon travaillé (couche) n'a pas d'influence sur le K_D en travail du sol conventionnel, tandis qu'il est important en situation de travail simplifié, le K_D étant beaucoup plus élevé dans le lit

de semence de ce dernier (surface).

Par contre l'effet combiné du travail du sol et de la classe de teneur en $CaCO_3$ sur le K_D montre des effets contradictoires qui peuvent laisser penser que l'effet révélé par l'analyse de la variance est fortuit. En effet on voit que les échantillons en travail conventionnel ont un K_D plus faible que ceux en travail simplifié quand le sol n'est pas carbonaté, mais c'est l'inverse qui se produit pour les sols carbonatés.

L'effet du partitionnement vertical de l'horizon labouré sur la fraction d'eau immobile semble avoir des effets croisés avec la classe de texture (P = 0.013215 *), la classe de pH (P = 0.0026088 **), et le type pédologique simplifié (P = 0.021313 *).

f _{IMM.}	[%]	Cl. t	ext.	Cl.	. pH	Type R	P simp.
		'LA'	'AL'	< 7	\geq 7	R. & C.	autre
Couche	Lit de sem.	49	27	74	31	31	49
	Reste horiz.	78	85	70	81	86	69

tableau 82 – Valeurs médianes de la fraction d'eau immobile pour les différents groupes d'échantillons {couche ; classe de texture} ou {couche ; classe de pH}, ou {couche ; type pédologique simplifié}.

L'examen du tableau 82 montre un effet combiné assez net du partitionnement vertical de l'horizon labouré avec la classe de texture. Le lit de semence a une fraction d'eau immobile plus faible (effet le plus net) et la classe de texture vient modérer ('LA') ou accentuer ('AL') les différences, la fraction d'eau immobile la plus faible étant obtenue avec les lits de semence de texture 'AL' (5 échantillons concernés).

Il apparaît que les sols dont le pH est inférieur à 7 voient leur teneur en eau immobile peu affectée par la couche de sol, tandis que pour les sols dont le pH est supérieur ou égal à 7, la fraction d'eau immobile est bien inférieure dans le lit de semence que dans le reste de l'horizon travaillé. Une hypothèse pouvant expliquer ce constat est une moindre stabilité structurale des sols un peu acides, entraînant du même coup une baisse de la connectivité du réseau poral.

L'effet combiné de la couche de sol et du type pédologique simplifié apparaît être moins net sur le tableau 82, si ce n'est fortuit. En effet on observe bien une fraction d'eau immobile plus faible dans le lit de semence que dans le reste de l'horizon travaillé, mais le groupe des RENDOSOLS et CALCISOLS a une teneur en eau immobile plus basse dans le lit de semence que les autres types de sol, mais dans le reste de l'horizon une fraction d'eau immobile plus élevée.

Des analyses de la variance à deux ou plusieurs facteurs contrôlés ont été réalisées de la même manière sur les autres propriétés quantitatives importantes (DT_{50} , K_S , K_{OC}), en testant les différents croisements possibles des propriétés qualitatives présentées plus haut (analyse de la variance à un facteur contrôlé), mais les résultats ne sont pas ou peu significatifs (non présentés ici).

4.5 Étude de la variabilité par Analyse en Composantes Principales

Les matériels et méthodes relatifs à cette partie sont exposés p. 141.

Abrev.	Nom.	Abrev.	Nom.
A _{ND}	Teneur en argile non décarbonatée	L _{ND}	Teneur en limon totale non décarbonatée
\mathbf{S}_{ND}	Teneur en sable totale non décarbonatée	EG	Teneur en éléments grossiers totaux
CaCO ₃	Teneur en carbonates de calcium	pH H ₂ O	pH mesuré avec la méthode à l'eau
C_org	Teneur en carbone organique	$ ho_b$	masse volumique apparente
θ_{S}	Teneur en eau volumique à saturation	θ_{pF2}	Teneur en eau volumique au pF 2
$\theta_{pF4,2}$	Teneur en eau volumique au pF 4,2	$\mathbf{f}_{\mathbf{IM}}$	Fraction d'eau immobile (volumique)
Ks	Conductivité hydraulique à saturation	DT ₅₀	Temps de demi-vie de dégradation de l'isoproturon
DT ₅₀ m	Temps de demi-vie de minéralisation de l'isoproturon	K _D	Coefficient d'adsorption linéaire de l'isoproturon ($K_{\rm D}$)
K _{OC}	Coefficient d'adsorption linéaire de l'isoproturon normalisé par la fraction de carbone organique	K _{-1cm}	$K_{(h=-1cm)}$, conductivité hydraulique à -1 cm
1	Travail du sol conventionnel <i>OU</i> lit de semence	2	Travail du sol simplifié <i>OU</i> reste de l'horizon travaillé
r	Rendosols	с	CALCISOLS
b	Brunisols	р	PSEUDO-LUVISOLS
n	NÉOLUVISOLS	1	LUVISOLS

Abréviations des noms de propriétés

tableau 83 – Abréviations des noms de propriétés utilisées pour les ACP et les PLSR.

La profondeur du sol, peu corrélée aux autres propriétés, n'a pas été inclue dans les analyses présentées ici (mais a été testée). Les paramètres b, h_A et la réserve utile de l'horizon ont aussi été écartées au profit des teneurs en eau caractéristiques (à pF 2, pF 4,2 et saturation), à partir desquelles les 3 paramètres cités plus haut sont calculés. Cela permet aussi de limiter la redondance des informations, qui nuit à la lisibilité des résultats de l'ACP.

Pour des raisons de lisibilité, les analyses en composantes principales sont réalisées en prenant un panel de propriétés agro-pédologiques de base (granulométrie ...), systématiquement utilisé, avec une ou deux propriétés d'intérêt (K_S, K_D, DT₅₀, *etc.*), dont on cherche à comprendre la variabilité spatiale. Les liens entre les propriétés d'intérêt ne sont pas examinés, car il n'y a pas probablement pas d'intérêt à prédire l'une avec l'autre (ex. K_Savec DT₅₀).

Variabilité des propriétés physico-chimiques & de rétention en eau des échantillons

Avant de procéder à un examen des propriétés les plus importantes pour le devenir de l'isoproturon dans les sols (DT_{50} , K_D , K_{OC} , K_S), il est nécessaire d'examiner les liens entre les propriétés pédologiques (physico-chimiques ou de rétention en eau) plus simples à mesurer. L'analyse en composantes principales permet d'examiner ces liens, par une décomposition de la variabilité des échantillons en strates (composantes) indépendantes.



figure 86 – résultats de l'ACP sur les propriétés physico-chimiques et de rétention en eau des échantillons.

Pour chacun des 4 graphiques, deux composantes sont représentées dans le plan : la droite horizontale représente une première composante (composante 1 pour (A) et (B), composante 3 pour (C) et (D)), la droite verticale représente la deuxième composante (composante 2 pour (A) et (B), composante 4 pour (C) et (D)). L'axe du haut représente le poids des propriétés sur la composante horizontale, l'axe de droite représente le poids des propriétés sur la composante verticale. L'axe du bas représente le poids des observations dans la composante horizontale, l'axe de gauche représente le poids des observations dans la composante verticale. Les graphiques (A) et (B) représentent les mêmes résultats, mais en mettant en évidence des informations différentes (comme pour les graphiques (C) et (D)). Les graphiques de gauche mettent en évidence les observations, notées selon la convention $\{n^{\circ} du site:strate\}$, avec en grisé les vecteurs des propriétés projetées. Les graphiques de droite mettent en évidence les propriétés (flèches) avec en grisé la position des observation set une information synthétique selon la convention $\{type de sol,modalité de travail du sol\}$. Ces propriétés sont affichées, mais n'ont pas été utilisées dans l'ACP) ; *la signification des abréviations est donnée dans le tableau 83, p. 220*.

J. Moeys | Partie IV

Pas moins de 4 composantes sont nécessaires pour expliquer 79 % de la variabilité des échantillons du point de vue de leurs propriétés physico-chimiques de base (figure 86). Le poids des propriétés pédologiques dans la construction des composantes est généralement modéré et homogène. Les coefficients, dont les valeurs peuvent aller de -1 à 1, ne dépassent généralement pas l'intervalle -0.5 à 0.5 (dans ces 4 composantes), ce qui montre qu'aucune propriété pédologique ne porte une part dominante de la variabilité des observations.

Sur les composantes 1 & 2, la seule propriété qui se détache est la teneur en limon non-décarbonatée, qui pèse surtout sur la composante 1 (positivement). Un groupe de propriétés a, sur la même composante (et donc la même part de variabilité), un effet opposé (négatif) : les teneurs en $CaCO_3$, en argile non-décarbonatée et en éléments grossiers, ainsi que le pH. On retrouve ici la segmentation entre les sols à ambiance 'carbonatée' et les sols 'non-carbonatés' qui se détachaient avec les analyses de la variance non-paramétriques. Les propriétés liées à la structure du sol, comme la masse volumique apparente et les teneurs en eau à pF 2 et pF 4,2 se distinguent surtout sur la 2^e composánte (donc une autre part de la variabilité globale), avec un poids positif. À l'opposé, mais sur la même composante, se détache la teneur en eau à saturation.

Le carbone organique a une importance faible et homogène sur les 2 composantes (négative).

La répartition des observations sur les 4 composantes est, elle aussi, instructive. Tout d'abord on ne distingue pas de 'groupes' bien individualisés, quelle que soit la composante. Si des 'groupes' distincts existent, comme les propriétés pédologiques ou les pratiques agronomiques peuvent le laisser entendre, la segmentation n'est pas brutale sur les propriétés du sol.

Ensuite, les informations additionnelles affichées sur les graphiques de l'ACP (site, couche de sol, type de sol ...) montrent que les axes ont une certaine pertinence.

- Sur le graphique (A), on voit que la composante n^o permet de distingu er les échantillons du lit de semence des échantillons prélevés dans le reste de l'horizon travaillé (les premiers XX:1, négativement liés à la composante 2; les seconds XX:2 positivement liés à la composante). Cela montre notamment que la stratification verticale de l'horizon travaillé influence surtout les propriétés hydriques : le lit de semence a une teneur en eau à saturation élevée, mais une teneur en eau à pF 2 et 4,2 relativement plus faible, et inversement pour les échantillons du reste de l'horizon travaillé.
- Sur le graphique (B) les informations relatives au type de sol (rx, cx, bx, px, nx, lx) sont plus mitigées. Les 2 composantes ne semblent pas distinguer nettement les types de sol. Cela confirme les analyses de la variance qui ne mettaient pas (ou rarement) en évidence d'effet type de sol (en 6 classes comme en 2 classes simplifiées) sur les propriétés physico-chimiques.
- La modalité de travail du sol, exprimée sur le graphique (B) par les symboles x1 ou x2 (respectivement travail conventionnel ou travail simplifié) n'est pas segmentée par les axes 1 et 2 de l'ACP.
- Enfin l'échantillon 17:1 se détache nettement, sur la partie négative de l'axe 1. Il ne s'agit pas d'une valeur aberrante, dans la mesure où il s'agit d'un sol identifié comme un Rendosol, donc particulièrement calcaire.

Il ressort de ces constants que l'axe 1 de l'ACP reflète les caractéristiques granulométriques fines et grossières du sol (et le carbonate associé aux

éventuelles fractions grossières), tandis que l'axe 2 est un axe lié à la structure du sol et à ses propriétés de rétention en eau, qui distingue bien la stratification verticale de l'horizon travaillé.

Sur le graphique (D), on voit que l'axe 4 (12 % de la variabilité) est surtout influencé (négativement) par la masse volumique apparente, la teneur en eau à saturation et la teneur en éléments grossiers. L'axe 3 est influencé par le carbone organique et la teneur en eau au pF 2.

La répartition des observations n'est plus dirigée par la stratification verticale de l'horizon travaillé, mais par plutôt par la modalité de travail du sol. On voit que les sols en travail simplifié (x^2) sont plutôt dans sous la diagonale y = x tandis que les sols en travail conventionnel sont plutôt au-dessus de la diagonale y = x. Cette partition est relativement logique, puisqu'elle indique que les sols en travail simplifié tendent à être plus denses et plus organiques, avec une teneur en eau à saturation élevée. Cependant, une partie non négligeable des observations est proche du croisement de l'axe 3 et 4, ce qui montre que cette distinction n'est pas valable pour toutes les observations.

En résumé les 20% de variabilité reflétés par les axes 3 et 4 mettent en évidence une distinction entre les sols en travail simplifié et les sols en travail conventionnel, pour une partie seulement des échantillons.

Variabilité des propriétés physico-chimiques et de la fraction d'eau immobile





La légende de la figure 86 (p. 221) donne une description détaillée des graphiques tirés d'une ACP ; *la signification des abréviations est donnée dans le tableau 83, p. 220*. Les composantes 3 et 4 ne sont pas présentées car le poids de la fraction immobile y est faible.

Les graphiques (A) et (B) de la figure 87, qui montrent les résultats de l'ACP sur les composantes 1 et 2, fait apparaître des liens modérés, entre la fraction d'eau immobile et les autres propriétés physico-chimiques du sol. Assez logiquement la fraction d'eau immobile est (positivement) corrélée aux propriétés liées à la structure du sol, la masse volumique apparente et les teneurs en eau aux pF 2 et 4,2. Elle est aussi négativement corrélée, mais dans une moindre mesure, à la teneur en eau à

saturation. Les fractions fines et grossières du sol apparaissent relativement indépendantes de la fraction d'eau immobile du sol pour les 58 % de variabilité globale expliqués par les axes 1 et 2.

La localisation des observations sur ces deux axes est cohérente avec ce qui est observé sur la figure 86, avec une **distinction entre les échantillons du lit de semence et ceux du reste de l'horizon travaillé**. Les seconds **ont une fraction d'eau immobile plus importante**.

Les 18 % de variabilité portés par les axes 3 et 4 ne font pas apparaître de liens secondaires entre la fraction d'eau immobile et les autres propriétés. Le poids de la fraction d'eau immobile est faible sur ces axes.

Les liens modérés entre la fraction d'eau immobile et la classe de pH, ou la classe de teneur en éléments grossiers qui étaient mis en évidence par les analyses de la variance non paramétriques ne sont pas confirmés par l'ACP.

La propriété fraction d'eau immobile s'écarte un peu de la normalité, et présente une distribution d'allure bimodale. De ce fait une ACP a été tentée sur une transformation de la fraction d'eau immobile, par centrage-réduction puis élévation au carré. La propriété transformée est plus proche d'une distribution normale (significativement), mais le résultat de l'ACP est moins bon que dans le cas d'une propriété non transformée (propriété faible sur les composantes 1 et 2). Cette transformation ne présente donc pas d'intérêt.

Variabilité des propriétés physico-chimiques et de la conductivité hydraulique (K_{-1cm} et K_S)

\Box Conductivité hydraulique à saturation ($K_{S.}$)

Les deux premiers axes représentent 54 % de la variabilité des échantillons. La conductivité hydraulique à saturation semble un peu liée aux propriétés de l'axe 2, mais ce lien est faible. Il est donc difficile de lier la conductivité à saturation à ce niveau de variabilité.

Le lien est beaucoup plus net sur l'axe 4, mais ce dernier ne reflète que 10 % de la variabilité totale. La conductivité hydraulique à saturation est bien liée à la masse volumique apparente sur cet axe. L'échantillon 05:1 contribue fortement à cet axe et on peut donc se demander si la relation conductivité hydraulique – masse volumique apparente n'est pas en partie liée à ce cas extrême (et donc peut être fortuite).

L'analyse par ACP n'est donc pas vraiment concluante pour faire apparaître les déterminismes pédologiques ou agronomiques de la conductivité hydraulique à saturation.

Les liens entre la conductivité hydraulique à saturation et les propriétés qualitatives que sont la classe de texture, la classe de teneur en éléments grossiers, la classe de pH ou le type pédologique simplifié mis en évidence par les analyses de la variance ne sont pas confirmés ici. Il est possible que l'analyse de la variance non paramétrique tolère mieux les propriétés fortement non-normales comme le K_s. Il n'a pas été possible de tester une ACP sur une transformation du K_s, car aucune des transformations testées ne permettait d'obtenir une propriété de distribution normale.





\Box Conductivité hydraulique à $-1 \text{ cm}(K_{-1 \text{ cm}})$

La conductivité hydraulique à saturation étant dérivée de la conductivité mesurée au potentiel -1 cm, il est intéressant de tester les déterminismes de K_{-1 cm}.

L'ACP présentée sur la figure 88 fait assez clairement apparaître les relations entre K_{-1cm} et certaines propriétés physiques du sol. La propriété est liée positivement à la teneur en eau à saturation et en carbone organique, et négativement à la teneur en eau au pF2 et à la masse volumique apparente. Ces liens ne sont pas très forts, aucune propriété ne pesant lourdement sur l'un ou l'autre des axes 1 & 2 (54 % de la variabilité).

Ces conclusions confirment les tendances qui se dégageaient moins nettement de l'ACP réalisée avec le K_s .

Sur cette ACP, on constate que les échantillons du lit de semence sont liés à des conductivités hydrauliques plus élevées que dans le reste de l'horizon

travaillé.

Les axes 3 et 4 de l'ACP réalisée avec K_{-1cm} n'apportent pas d'information supplémentaire pour cette propriété.

Une ACP a été tentée sur une transformation du K_{-1cm}. La transformation consiste à centrer et réduire la propriété/variable, puis à calculer sa valeur inverse. La propriété transformée est plus proche d'une distribution normale (significativement), mais le résultat de l'ACP est moins bon que dans le cas d'une propriété non transformée (poids de la propriété faible sur les composantes 1 et 2). Cette transformation ne présente donc pas d'intérêt.

Variabilité des propriétés physico-chimiques et de l'adsorption de l'isoproturon



 \Box Coefficient d'adsorption linéaire (K_D)

figure 89 – résultats de l'ACP sur les propriétés physico-chimiques, de rétention eau des échantillons et d'adsorption linéaire de l'isoproturon.

La légende de la figure 86 (p. 221) donne une description détaillée des graphiques tirés d'une ACP ; *la signification des abréviations est donnée dans le tableau 83, p. 220*.

L'ACP réalisée avec le K_D et les propriétés physico-chimiques et hydriques du sol ressemble beaucoup à celles réalisées avec les conductivités hydrauliques à saturation et h = -1 cm. Les axes 1 et 2, qui portent 56 % de la variabilité globale, montrent que le K_D est positivement lié à la teneur en matière organique et à la teneur en eau à saturation, et négativement lié à la masse volumique apparente (le lien avec la teneur en eau au p F2 est moins net que pour la conductivité hydraulique à saturation). Les axes 3 et 4, qui portent 22 % de la variabilité, montrent aussi un lien entre le K_D et la teneur en eau au pF4,2.

Si l'on observe la position du K_D par rapport aux observations (axes 1 et 2, (A)), on voit que les échantillons du lit de semence sont associés à des valeurs plus élevées du K_D que les échantillons du reste de l'horizon travaillé. On pourrait se demander si ce constat n'est pas dû aux plus fortes teneurs en matière organique du lit de semence des échantillons issus de parcelles en travail simplifié, mais le graphique (B) ne confirme pas cette hypothèse (les deux modalités de travail du sol sont présentes dans la partie haute, associée à des K_D plus élevés). Par contre l'ACP présentée sur la figure 86 (p. 221) montrait que les échantillons du lit de semence ont globalement une masse volumique apparente plus faible, ont une teneur en eau à saturation plus élevée, et une teneur en eau aux pF 2 et 4,2 plus basse, ce qui est cohérent avec les constats faits pour le K_D .

On constate assez nettement sur les axes 1 et 2 que le K_D n'est pas ou peu lié aux fractions granulométriques fines et grossières. Les axes 3 et 4 vont dans le même sens, à l'exception d'un lien très modéré (négatif) entre le K_D et le pH ou la teneur en CaCO₃.

On peut se demander si les associations mises en évidence entre le K_D (ou le K_{-1cm}) et le pH ou la teneur en CaCO₃ reflètent une réalité de fonctionnement physique ou chimique du sol, ou s'il s'agit d'un lien indirect de ces propriétés avec les propriétés physico-chimiques et de rétention en eau du sol, liens qui dériverait d'autres propriétés du sol non mesurées ici.

Dans le cas du K_D , seule la relation avec le carbone organique trouve une explication claire et évidente dans les processus physico-chimiques de l'adsorption des molécules sur les matières organiques du sol. Les liens avec les propriétés de rétention en eau du sol sont d'autant plus surprenants que le K_D est mesuré sur des échantillons tamisés, puis complètement dispersés sous l'action de l'agitation dans la solution contenant l'isoproturon. La porosité est donc en grande partie détruite lors de la mesure. Il est possible que ce lien résulte de l'association circonstancielle entre la teneur en carbone organique et les propriétés de rétention en eau du sol et de masse volumique apparente, sous l'effet combiné de la préparation du lit de semence par les outils agricoles et de l'accumulation de matières organiques en surface quand le sol n'est pas labouré (ce 2^e point n'est pas confirmé par l'ACP).

Une ACP réalisée avec les fractions granulométriques décarbonatées (à la place des fractions non-décarbonatées) donne des résultats similaires (non présentés ici).

Coefficient d'adsorption normalisé par la fraction de carbone organique (K_{OC})





La légende de la figure 86 (p. 221) donne une description détaillée des graphiques tirés d'une ACP ; la signification des abréviations est donnée dans le tableau 83, p. 220.

Les résultats de l'ACP réalisée avec le K_{OC} sont assez indépendants de ceux obtenus avec le K_D (figure 89).

Sur les axes 1 et 2, qui représentent 57 % de la variabilité totale, le Koc est positivement (mais faiblement) lié à la première composante, comme la teneur en limon non-décarbonatée (le K_D est surtout lié à la 2^e composante). La teneur en argile, en éléments grossiers, en sables, en CaCO3 et le pH sont sur le même axe, mais avec un coefficient négatif. Cela signifie par exemple que les sols à teneur en argile plus élevée ont un K_{oc} plus faible.

Sur les axes 3 et 4, le K_{oc} apparaît bien corrélé à la teneur en sable, et négativement corrélée à la masse volumique apparente et la teneur en éléments grossiers. Sur ces deux axes, qui comptent pour 19 % de la variabilité, les échantillons en travail conventionnel semblent plus nombreux pour les valeurs de K_{OC} fortes, et les échantillons en travail simplifié se placent de l'autre côté de l'axe 4, avec des K_{OC} plus faibles et des masses volumiques plus importantes.



Variabilité des propriétés physico-chimiques, de la dégradation et de la minéralisation de l'isoproturon



La légende de la figure 86 (p. 221) donne une description détaillée des graphiques tirés d'une ACP ; *la signification des abréviations est donnée dans le tableau 83, p. 220*.

Les 4 axes expliquent 75 % de la variance expliquée. La DT_{50} de dégradation de l'isoproturon a un poids très faible sur les axes 1 et 2 de l'ACP. Les distinctions précédentes (figure 86), basées sur (i) les fractions granulométriques fines et grossières ou sur (ii) les propriétés de masse volumique apparente et de rétention en eau n'ont que peu d'importance vis à vis de la DT_{50} sur les axes 1 et 2 (54 % de la variabilité globale).

Par contre sur les axes 3 et 4 la DT_{50} de dégradation de l'isoproturon se détache nettement, avec un poids positif sur l'axe 3 et un poids positif sur l'axe 4 (d'intensité équivalente). Deux propriétés s'opposent nettement à la DT_{50} , la teneur en limon non décarbonatée et la teneur en eau à saturation.

Il parait cependant difficile de discriminer les valeurs de DT_{50} sur ces critères (% limon et θ_s). Il ne s'agit que de 20% de la variabilité globale des échantillons, et la distinction qui semblait se dessiner précédemment (tableau 73, p. 214) entre les modalités de travail du sol simplifié et conventionnelle n'apparaît plus sur les axes 3 et 4 de cette ACP.

Il ressort de ces constants que la variabilité de la DT_{50} de l'isoproturon est malheureusement indépendante d'une part essentielle de la variabilité des propriétés du sol (composantes 1 et 2), et qu'elle porte seule une large part de la variabilité sur les composantes 3 et 4.

4.6 Prédiction des propriétés à l'aide de classes ou de fonctions de pédotransfert locales : faisabilité

Les matériels et méthodes relatifs à cette partie sont exposés p. 142.

Le faible nombre de sites de mesure et la forte variabilité spatiale des sols rendent très incertaines des approches de spatialisation des propriétés importantes du sol ou de l'isoproturon³⁹ par interpolation.

Il est donc nécessaire de passer par une couche d'information intermédiaire, déjà spatiale, comme une carte de sol ou une image satellite. Les propriétés plus 'simples' renseignées par la carte de sol (texture de surface, type de sol) ou par l'image satellite (compte numérique ou réflectance) peuvent servir à prédire les propriétés d'intérêt, dans la mesure où il existe un lien statistique (ou physique) entre les propriétés simples et les propriétés d'intérêt.

Ce 'lien statistique' peut être discontinu (on parle alors de 'classes de pédotransfert') ou continu (on parle alors de 'fonctions de pédotransfert'). Il est nécessaire d'évaluer la qualité de la prédiction (erreurs) pour déterminer la pertinence de ces dernières.

Classes de pédotransfert locales

La prédiction de propriétés importantes du sol et/ou de l'isoproturon à partir de leurs valeurs moyennes par classes est une méthode de prédiction simple (classes de pédotransfert). Couplée à l'usage d'une carte de sol, dont on peut extraire la répartition géographique des classes d'intérêt, les 'classes de pédotransfert' doivent permettre de spatialiser les propriétés importantes du sol ou de l'isoproturon.

Seule une partie des classes de pédotransfert testées est présentée ici.

³⁹ Propriétés hydriques, teneur en eau immobile, adsorption et demi-vie de l'isoproturon.

Propriété qualitative	Classe 'K.1cm' élevé	
Couche	1	
Classe de texture	AL	
Classe pédologique simplifiée	{ R , C }	
Classe de pH	≥ 7	
Classe de teneur en CaCO ₃	≥ 4 g.kg ⁻¹	
Classe de teneur en éléments grossiers	≥ 40 g.kg ⁻¹	

\Box Classes de pédotransfert pour le K_S ou $K_{-1 cm}$

tableau 84 – Propriétés qualitatives utilisées pour discriminer les valeurs de conductivité hydraulique à h = -1 cm.

30 échantillons sont classés 'valeurs élevées', 20 sont classés 'valeurs basses'. Un échantillon donné sera globalement classé comme ' $K_{-1 cm}$ élevé' si au moins <u>deux</u> des critères décrits ci-dessus sont favorables à une valeur de $K_{-1 cm}$ élevée (par exemple classe de texture AL et teneur en CaCO₃ \geq 4 g.kg₋₁).

La valeur de K_{-1cm} de chaque catégorie a été calculée en prenant la valeur médiane, qui donne des résultats un peu meilleurs qu'avec la valeur moyenne.

Le K_{-1cm} moyen de la catégorie 'valeurs élevées' est de $0,025 \text{ mm.s}^{-1}$, celui de la classe 'valeurs basses' est de $0,006 \text{ mm.s}^{-1}$.

Les écarts à la moyenne relatifs obtenus par CV-LOO indépendante <u>sans</u> <u>prédiction</u>⁴⁰ sont de 69 % (RRMSEP%) ou de 67 % (MAPE%).

Les écarts entre les prédictions et les valeurs réelles obtenus par CV-LOO indépendante sont de 60 % (RRMSEP%) ou de 58 % (MAPE%).

La différence d'erreur est donc de 10 %, la prédiction n'a donc quasiment aucune utilité ici. D'autres combinaisons de propriétés qualitatives et d'autres seuils ont été testés, mais ils ne donnent pas de meilleurs résultats.

Les prédictions sur le K_s sont encore moins bonnes.

\Box Classes de pédotransfert pour le K_{OC}

Comme le K_D est généralement prédit à partir d'une estimation du K_{OC} et d'une valeur de teneur en carbone organique, les prédictions catégorielles ont été tentées directement sur le K_{OC} . Le K_{OC} est lié à certaines propriétés qualitatives qui ont été testées.

Propriété qualitative	Classe 'K _{oc} ' élevé
Classe de texture	LA
Classe pédologique simplifiée	$\{B,P,N,L\}$
Classe de teneur en CaCO3	≤ 4 g.kg ⁻¹
Classe de teneur en éléments grossiers	$\leq 40 \text{ g.kg}^{-1}$

tableau 85 – Propriétés qualitatives utilisées pour discriminer les valeurs de K_{oc}.

Un échantillon donné sera globalement classé comme ' K_{OC} élevé' si au moins <u>deux</u> des critères décrits ci-dessus sont favorables à une valeur de K_{OC} élevée (par exemple classe de texture LA et teneur en CaCO3 \leq 4 g.kg⁻¹).

La valeur de K_{oc} de chaque catégorie a été calculée en prenant la valeur moyenne qui donne des résultats un peu meilleurs qu'avec la valeur médiane.

⁴⁰ Il s'agit d'une 'fausse prédiction' destinées à servir de point de référence en terme d'erreur de prédiction : la valeur prédite de la variable X pour la i^e mesure est égale à la moyenne de X (de i=1 à n)

Le K_{OC} moyen de la classe 'valeurs élevées' est de 86 L.kg^{-1} , celui de la classe 'valeurs basses' est de 69 L.kg^{-1} .

Les écarts à la moyenne relatifs obtenus par CV-LOO indépendante <u>sans prédiction</u> sont de 18 % (RRMSEP%) ou de 15 % (MAPE%).

Les écarts entre les prédictions et les valeurs réelles obtenus par CV-LOO indépendante sont de 16 % (RRMSEP%) ou de 13 % (MAPE%).

La différence d'erreur est donc de 1 à 2 %, la prédiction n'a donc quasiment aucune utilité ici ! D'autres combinaisons de propriétés qualitatives et d'autres seuils ont été testés, mais ils ne donnent pas de meilleurs résultats.

\Box Classes de pédotransfert pour la DT_{50} de l'isoproturon

Propriété qualitative	Classe 'DT ₅₀ ' élevé
Modalité de travail du sol	conventionnel
Classe de texture	LA
Classe pédologique simplifiée	$\{B,P,N,L\}$
Classe de teneur en CaCO3	$\leq 4 \text{ g.kg}^{-1}$
Classe de teneur en éléments grossiers	$\leq 40 \text{ g.kg}^{-1}$

tableau 86 – Propriétés qualitatives utilisées pour discriminer les valeurs de DT₅₀.

Un échantillon donné sera globalement classé comme ' DT_{50} élevé' si au moins <u>deux</u> des critères décrits ci-dessus sont favorables à une valeur de DT_{50} élevée (par exemple classe de texture LA et teneur en CaCO3 \leq 4 g.kg⁻¹).

La valeur de DT₅₀ de chaque catégorie a été calculée en prenant la valeur médiane qui donne des résultats un peu meilleurs qu'avec la valeur moyenne.

La DT_{50} moyen de la classe 'valeurs élevée' est de 7,75 j, celui de la classe 'valeurs basses' est de 4,75 j.

Les écarts à la moyenne relatifs obtenu par CV-LOO indépendante <u>sans prédiction</u> sont de 75 % (RRMSEP%) ou de 61 % (MAPE%).

Les écarts entre les prédictions et les valeurs réelles obtenus par CV-LOO indépendante sont de 73 % (RRMSEP%) ou de 57 % (MAPE%).

La différence d'erreur est donc de 2 à 4 %, la prédiction n'a donc quasiment aucune utilité ici. D'autres combinaisons de propriétés qualitatives et d'autres seuils ont été testés, mais ils ne donnent pas de meilleurs résultats.

□ Classes de pédotransfert pour d'autres propriétés

La prédiction d'autres propriétés a été envisagée. Les résultats pour la prédiction de la teneur en eau à saturation et aux pF 2 et 4,2, et de la réserve utile sont défavorables (réduction de l'erreur insignifiante).

□ Conclusions sur les classes de pédotransfert

Les classes de pédotransfert testées ici n'apportent rien par rapport aux écarts à la moyenne. Cela signifie que la prédiction est inopérante, il n'est donc pas pertinent d'utiliser cette approche, combinée à la carte de sol, pour spatialiser les propriétés hydriques et les propriétés d'interaction sol-isoproturon.

Fonctions de pédotransfert locales

□ Approche par régression multivariée : PLSR

Fonction de pédotransfert pour le K_{SAT}.

L'analyse PLSR présentée ici se base sur une prédiction de la conductivité hydraulique à saturation avec un jeu de 11 propriétés initiales : les teneurs en argile, en limons et en sables totaux sans décarbonatation, les teneurs en carbone organique et en azote total, les teneurs en $CaCO_3$ et en éléments grossiers totaux, le pH, les teneurs en eau à pF 2, pF 4,2 et à saturation et la masse volumique apparente. Pour le K_{SAT} comme pour les autres propriétés à prédire, d'autres jeux de données ont été testés (granulométries après décarbonatation notamment), mais les résultats ne sont pas exposés ici, faute d'être meilleurs.

La procédure de sélection des propriétés aboutit à en sélectionner 2 : la masse volumique apparente et la teneur en eau au pF 2. La propriété la plus importante est la teneur en eau à pF 2 (VIP : 1,39), puis la masse volumique apparente (VIP : 0,25).

La RMSEP évaluée par CV-LOO (partiellement indépendante) aboutit à une RMSEP de 0,5039 mm.s⁻¹.

En comparaison, la RMSEP d'une régression linéaire simple entre conductivité à saturation et la masse volumique apparente aboutit à une RMSEP de 0,5025 mm.s¹. Les écarts à la moyenne relatifs obtenus par CV-LOO indépendante <u>sans prédiction</u> sont de 100 % d'erreur (RRMSEP%), avec une RMSEP de 0,5023 mm.s⁻¹.

L'utilisation de la PLSR ou d'une régression linéaire simple n'apporte rien à la prédiction de la conductivité hydraulique à saturation.

Fonction de pédotransfert pour K.1cm (après transformation de la propriété) :

Si les paramètres $\theta_{s.}$, h_A et 'b' sont connus, la conductivité hydraulique à saturation peut être dérivée directement d'une donnée de conductivité non-saturée. Pour cette raison, il peut être intéressant de tester les déterminismes de la conductivité hydraulique à -1cm qui a été mesurée (et éventuellement les possibilités de prédiction de celle-ci avec d'autres propriétés).

Le paramètre K_{-1cm} a une distribution qui s'écarte assez significativement de la normalité (test de Shapiro), mais contrairement au K_{SAT} , il s'est avéré possible de le transformer pour obtenir une distribution se rapprochant de la normale. C'est donc la valeur transformée de cette propriété qui a été utilisée. La transformation consiste à centrer-réduire la propriété (équation 67), puis à appliquer la transformation inverse décrite par l'équation 68.

La réalisation d'une PLSR sur la propriété transformée ne permet pas de réduire l'erreur de prédiction de manière substantielle (RMSEP de 0,1163 au lieu de 0,1380 de RMSEP sans prédiction). Il est à noter que l'erreur relative (RRMSEP) est de 30 % au lieu de 100 % avec les conductivités non transformées.

- Fonction de pédotransfert pour la teneur en eau immobile au potentiel -1 cm

L'analyse PLSR présentée ici se base sur une prédiction de la fraction d'eau immobile avec un jeu de 11 propriétés initiales, propriétés physico-chimiques et hydriques du sol (granulométrie non-décarbonatée).

La procédure de sélection des propriétés aboutit à en sélectionner 4 : la teneur en carbone organique, la teneur en $CaCO_3$, la masse volumique apparente et la teneur en eau au pF 2. La propriété la plus importante est la masse volumique apparente (VIP : 1,17), puis le carbone organique et la teneur en eau à pF 2 (VIP : 1,07 et 1,01).

La RMSEP évaluée par CV-LOO (partiellement indépendante) aboutit à une RMSEP de 21 % (fraction de la teneur en eau à -1 cm).

En comparaison, la RMSEP d'une régression linéaire simple entre la fraction d'eau immobile et la masse volumique apparente aboutit à une RMSEP de 24 %. Les écarts à la moyenne relatifs obtenus par CV-LOO indépendante <u>sans prédiction</u> sont de 43 % d'erreur (RRMSEP%), avec une RMSEP de 26 %.

L'utilisation d'une prédiction par PLSR de la fraction d'eau immobile réduit d'à peine 1/5^e l'erreur par rapport à une absence de prédiction. L'utilisation de la PLSR pour prédire la fraction d'eau immobile est donc peu pertinente.

Fonction de pédotransfert pour le K_{D.}

L'analyse PLSR présentée ici se base sur une prédiction du K_D avec un jeu de 11 propriétés initiales, propriétés physico-chimiques et hydriques du sol (granulométrie non-décarbonatée).

La procédure de sélection des propriétés aboutit à en sélectionner 6 : le **carbone organique** (C_org), la **teneur en limon** sans décarbonatation (L_T_ND) et en **éléments grossiers totaux** (EG_TOT), ainsi que les **teneurs en eau aux pF 2 et 4,2** (PF2_V, PF42_V). Les propriétés les plus importantes (VIP) sont le carbone organique, les éléments grossiers totaux et la teneur en limon. Une PLSR équivalente peut être obtenue en utilisant seulement ces propriétés (erreur de prédiction un peu plus élevée), ce qui souligne la redondance d'information entre les propriétés pour le K_D (MN_KD).





Avec 'Ord or' l'ordonnée à l'origine de la PLSR ; 'Rég. simple' : Régression linéaire simple entre le K_D et le carbone organique, $K_D = 0.257 + 0.062.$ corg ; voir le texte ci-dessus pour les abréviations.

On voit que la régression par PLSR permet de réduire quelque peu une tendance à la sous-estimation du K_D par rapport à la régression simple, mais la différence est peu visible. Les résultats (non présentés) de la régression linéaire simple montrent que

l'ordonnée à l'origine est significative au seuil 5 %, et que la pente est significative à un seuil inférieur à 0,1 %.

La RMSEP évaluée par CV-LOO (partiellement indépendante) aboutit à une RMSEP de 0,17 L.kg⁻¹.

En comparaison, la RMSEP d'une régression linéaire simple entre le K_D et la teneur en carbone organique aboutit à une RMSEP de $0,20 \text{ L.kg}^{-1}$. Les écarts à la moyenne relatifs obtenus par CV-LOO indépendante <u>sans prédiction</u> sont de 23% (RRMSEP%), avec une RMSEP de $0,25 \text{ L.kg}^{-1}$.

Ramené en écart moyen ou en écart moyen entre la prédiction et la valeur réelle, l'application d'une régression multiple fait passer l'erreur de 0,20 à 0,11. Cette évaluation est moins stricte que la RMSEP, mais elle met en évidence l'intérêt éventuel de cette prédiction.

L'amélioration de la prédiction du K_D par une régression multiple est donc relative, mais néanmoins acceptable.

Il est possible de trouver des hypothèses logiques aux facteurs sélectionnés pour cette PLSR. Le K_D de l'isoproturon est, comme pour de nombreux pesticides, positivement corrélé à la quantité de matières organiques. Ce lien est démontré de longue date (Wauchope et al., 2002). Les mesures de K_D sur les horizons profonds carbonatés ont montré que ces matériaux adsorbent très peu l'isoproturon. C'est donc logiquement que les éléments grossiers, souvent carbonatés, soient négativement corrélés à l'adsorption. Il est peu probable que les éléments grossiers de meulière (minéral siliceux : calcédoine) ou que les graviers de Lozère (pour partie des quartzs, donc siliceux) adsorbent l'isoproturon. Par contre ces différents types d'éléments grossiers ont des porosités différentes, ce qui pourrait expliquer des différences d'effet (non mesurées) sur le K_D, notamment si une part de l'adsorption est due à la diffusion dans les micropores. L'effet de la teneur en limon total sans décarbonatation est plus difficile à envisager, car ce sont généralement les fractions argileuses qui agissent sur l'adsorption. Peut-être les effets de la teneur en argile sont-ils contrebalancés par les effets inverses de la fraction sableuse (grossière notamment) qui est positivement corrélée avec la teneur en argile (r = 0.45), notamment dans les sols carbonatés, qui sont aussi plus argileux.

Les effets des teneurs en eau aux pF 2 et 4,2 sont plus difficiles à expliquer. On peut émettre l'hypothèse qu'il s'agit là d'un effet de la microporosité qui peut avoir un effet sur l'adsorption par diffusion. Les sols avec une teneur en eau à pF 4,2 faible auraient une microporosité moins abondante, tandis que les sols avec une teneur en eau élevée à pF 4,2 auraient une microporosité plus abondante, favorable à la diffusion. Deux éléments réduisent cette hypothèse : (i) les teneurs en eau aux pF 2 et 4,2 sont positivement corrélées (r=0,48), quand l'une est élevée, l'autre tend à l'être aussi (ii) La teneur en eau immobile, elle aussi liée à une porosité fine et/ou non continue, est <u>positivement</u> corrélée à la teneur en eau au pF 2, négativement corrélée à la teneur en eau au pF 4,2. Teneur en eau immobile et K_D ne sont d'ailleurs pas corrélés significativement.

Fonction de pédotransfert pour le K_{OC} .

L'analyse PLSR présentée ici se base sur une prédiction du K_D avec un jeu de 11 propriétés initiales, identique à celui utilisé pour le K_D .

La procédure de sélection des propriétés a abouti à sélectionner les mêmes

propriétés que dans le cas du K_D. Les propriétés les plus importantes (VIP) sont les éléments grossiers totaux et la teneur en limon. Le carbone organique a une importance plus faible, et les teneurs en eau aux pF2 et 4,2 ont une importance intermédiaire.



figure 93 – Coefficients de la régression multiple (PLSR) de prédiction du K_{oc}, et graphique valeurs prédites – valeurs réelles de la régression.

Avec 'Ord or' l'ordonnée à l'origine de la PLSR ; 'Rég. simple' : Régression linéaire simple entre le K_{OC} et le carbone organique, $K_{OC} = 88,720 + -0,274.EG_TOT$; voir le paragraphe précédent (K_D) pour les abréviations.

On voit que les régressions par PLSR ou linéaire simple tendent toutes les deux à sous estimer le K_{OC} quand sa valeur est élevée, et à le surestimer quand sa valeur réelle est faible. Les résultats (non présentés) de la régression linéaire simple montrent que l'ordonnée à l'origine et la pente sont significatives à un seuil inférieur à 0,1 %.

La RMSEP évaluée par CV-LOO (partiellement indépendante) aboutit à une RMSEP de 12 L.kg⁻¹.

En comparaison, la RMSEP d'une régression linéaire simple entre le K_{OC} et la teneur éléments grossiers ou entre le K_{OC} et la teneur en limon aboutit à une RMSEP de 13 L.kg⁻¹. Les écarts à la moyenne relatifs obtenus par CV-LOO indépendante <u>sans</u> <u>prédiction</u> sont de 18 % (RRMSEP%), avec une RMSEP de 15 L.kg⁻¹.

L'amélioration de la prédiction du K_{OC} par une régression multiple est donc très relative. Il n'y a pas d'amélioration notable par rapport à une prédiction du K_D par régression multiple (mêmes propriétés), les deux approches donnant un résultat équivalent.

*Fonction de pédotransfert pour la DT*₅₀ de l'isoproturon

L'analyse PLSR présentée ici se base sur une prédiction du DT_{50} avec un jeu de 11 propriétés initiales, identique à celui utilisé pour le K_D .

La procédure de sélection des propriétés aboutit à la sélection de la teneur en éléments grossiers et la teneur en eau à pF 2. La propriété la plus importante est la teneur en eau au pF2 (VIP : 1,12).

La RMSEP évaluée par CV-LOO (partiellement indépendante) aboutit à une RMSEP de 11 jours.

En comparaison, la RMSEP d'une régression linéaire simple entre la DT₅₀ et la

teneur éléments grossiers ou entre le DT_{50} et la teneur en eau à pF 2 aboutit à une RMSEP de 10 jours (*quasiment identique à celle de la PLSR sans arrondi*). Les écarts relatifs à la moyenne obtenus par CV-LOO indépendante <u>sans prédiction</u> sont de 68 % (RRMSEP%), avec une RMSEP de 11 jours.

L'amélioration de la prédiction du DT_{50} par une régression multiple ou une régression simple est donc nulle. Avec le jeu de données étudié, il n'y a pas d'intérêt à prédire la demi-vie de l'isoproturon par régression.

□ Approche par régression multivariée : GIFI-PLSR

L'utilisation de la méthode GIFI-PLSR n'a malheureusement pas permis d'améliorer la prédiction des propriétés d'intérêt. La méthode donne cependant des résultats similaires à ceux de la PLSR pour la prédiction du K_D et de la fraction d'eau immobile, ce qui montre qu'elle peut être aussi efficace que cette dernière. Les résultats sont identiques si l'on considère l'écart moyen entre la valeur prédite et la valeur réelle, mais moins bons si l'on considère la RMSEP. De tels écarts sont prévisibles, car la méthode GIFI-PLSR repose sur une dégradation partielle des propriétés. En l'absence de relations non-linéaires, son utilisation est discutable par rapport à une PLSR normale.

Les tests de régression GIFI-PLSR sur la DT_{50} de dégradation de l'isoproturon, sur le K_{OC} , la conductivité hydraulique à saturation et la réserve utile n'apportent rien par rapport aux résultats de la PLSR normale (ou les dégradent).

4.7 Synthèse, discussion et conclusion intermédiaire

Les tests statistiques effectués montrent que, prises deux à deux, il est possible d'identifier des liens entre les différentes propriétés du sol mesurées, qu'elles soient quantitatives ou qualitatives (corrélations, analyse de la variance). Ce lien est néanmoins généralement ténu. Il est parfois logique (une hypothèse d'explication rationnelle existe), mais pas toujours.

L'hypothèse qui en découle est que **les liens entre propriétés sont multiples** (e.g. une propriété est influencée par plusieurs autres) et complexes (e.g. une propriété est influencée par plusieurs autres, qui peuvent avoir des effets antagonistes). L'approche par **analyse de la variance** montre, elle-aussi, des liens entre propriétés, auxquels on peut souvent trouver des explications rationnelles, mais **ces liens restent (très) ténus**.

L'hypothèse supplémentaire à partir de ces conclusions est que les liens entre propriétés sont non seulement multiples, mais aussi peut-être non-linéaires. L'analyse de la variance est certes valide sur des données non-normales ou aux relations non-linéaires, mais elle se base sur une décomposition linéaire de la variabilité, peut être inadéquate. La modélisation statistique des liens entre propriétés 'simples' et les propriétés d'intérêt' ne peut dès lors reposer que sur une méthode de **régression linéaire robuste** (PLSR), ou une **méthode non-linéaire** (GIFI-PLSR), voire sur des **prédictions catégorielles**.

Or, si l'on excepte un succès mitigé de la PLSR pour la prédiction du K_D , ces tentatives de modélisation statistique des propriétés d'intérêt sont un échec. Plusieurs hypothèses non-exclusives peuvent être avancées pour expliquer

ce problème, elles sont détaillées dans la partie « Discussion & conclusions » qui suit.

Une question importante doit être discutée : pouvait-on, et fallait-il tenter de modéliser la variabilité spatiale des propriétés mesurées par une approche de type géostatistique ? Il a été choisi de privilégier d'autres approches au détriment de celle-ci, pour plusieurs raisons. Un micro-projet d'étudiants en Master (SILAT) sur une partie des sondages tarière ayant servi à élaborer la carte des sols du secteur a tenté une approche géostatistique de la variabilité spatiale de la profondeur du sol, de la teneur en argile et en éléments grossiers de surface. Ce travail n'est pas parvenu à mettre en évidence de structure spatiale de la variabilité, mais il s'est avéré par la suite que ces données contenaient des erreurs de positionnement des sondages (voir de numérotation pour certains d'entre eux; Delmas, 2007). Il existe une variabilité spatiale élevée de certains paramètres pédologiques à l'échelle de la parcelle. La profondeur du sol notamment est très variable, ainsi que la teneur en éléments grossiers et la teneur en argile des horizons argilo-limoneux de sub-surface. Ces variations sont dues notamment à des phénomènes périglaciaires de gélifraction, cryoturbation et solifluxion. Tout le secteur agricole ne semble pas affecté par ces phénomènes, mais ils ont été visualisés nettement sur les fosses de la parcelle d'étude, mais aussi sur plusieurs fosses (10 m x 10 m x 2 m) ouvertes pour l'implantation de l'embase d'éoliennes, au sud-est de Ouarville, dans le secteur étudié. Une estimation empirique de terrain de l'intervalle de distance sur laquelle la profondeur du sol et le taux d'éléments grossiers peut varier très significativement est de 5 mètres à 100 mètres, soit beaucoup moins que la distance minimale entre les 34 sites d'étude (figure 21 et figure 22, p. 93 et 94). Les horizons de surface semblent un peu moins variables du point de vue pédologique. Il subsiste cependant un effet parcelle probable lié aux pratiques culturales, ce qui peut s'avérer genant pour mettre en évidence une structure spatiale de propriétés mesurées dans des parcelles différentes. Enfin, le nombre de sites caractérisés (34) est une limitation forte, et non des moindres : Webster et Oliver (1992) affirment ainsi que les échantillons comprenant moins de 50 mesures 'ont peu de valeurs', et qu'un minimum de 100 mesures sont nécessaires pour estimer le variogramme d'une propriété du sol.

J. Moeys | Partie V

Partie V Discussion & conclusions

Retour sur les choix méthodologiques effectués et leurs limites

1 Discussion

■ 1.1 Identification des problèmes rencontrés

... ou l'analyse a posteriori d'un échec relatif...

Pour quelles raisons n'a-t-il pas été possible d'identifier clairement et de modéliser statistiquement les déterminismes de la variabilité des propriétés du sol et de l'isoproturon ?

Si des tendances sont observées, qui montrent des liens logiques entre les différentes propriétés mesurées, il n'a pas été possible de modéliser statistiquement la variabilité des propriétés d'intérêt de manière satisfaisante. Il est donc nécessaire de chercher à expliquer cet échec. Plusieurs hypothèses, non exclusives, sont possibles :

<u>Hypothèse 1</u>: Les propriétés agro-pédologiques mesurées ne sont pas les propriétés explicatives réelles des propriétés d'intérêt (K_{SAT} , K_D , K_{OC} , DT_{50}). On peut par exemple supposer que la prédiction des propriétés hydriques du sol bénéficierait d'une meilleure description (quantitative) de la structure du sol à l'échelle de la mesure (voir Lin *et al.*, 1999 *a* et *b*). Concernant le K_D , les pistes à envisager sont l'effet de la nature biochimique des matières organiques et l'effet des éléments grossiers et de la fraction sableuse. Les deux derniers paramètres ont été mesurés, mais pas sur une gamme de valeurs suffisamment étendue. Ils auraient aussi dû/pu être mesurés sur les quelques grammes de sol ayant servi à mesurer le K_D , et leur volume soustrait à celui de la terre fine, afin d'évaluer le K_D de la terre fine. En accord avec la bibliographie, une étude plus précise de la microflore dégradante du sol aurait peut-être permis de dégager quelques pistes d'explications de la DT_{50} . La spécificité de la flore dégradante et la complexité des processus en jeu en font une hypothèse réaliste, mais difficile à traiter à l'échelle d'un secteur agricole.

En l'absence de mesures additionnelles d'autres propriétés du sol, statuer sur leur rôle dans les déterminismes des propriétés d'intérêt dans le secteur agricole étudié n'est que pure spéculation. Une analyse plus approfondie des données de la littérature est nécessaire pour définir de futures pistes de recherche.

<u>Hypothèse 2</u> : les tests statistiques employés et les combinaisons de propriétés testées ne sont pas adéquats. Il est certain qu'il aurait été préférable d'utiliser une méthode de sélection des propriétés reconnue et validée (comme par exemple l'algorithme génétique employé par Kah *et al.*, 2007, pour leur étude des déterminismes de 10 pesticides). Les tests statistiques alternatifs sont nombreux, mais cette étude manque pour l'instant de recul pour définir lesquels mériteraient d'être testés (arbres de régression ?).

<u>Hypothèse 3</u> : La variance/variabilité résiduelle est trop importante et masque les relations entre les propriétés (voir Webster, 2007, pour un exemple sur l'analyse de la variance). Plusieurs raisons sont possibles pour cela :

<u>Hypothèse 3.a</u> : Il existe pour un même site un décalage spatial entre les différentes mesures, alors que la variabilité du sol s'exprime à une échelle inférieure à la distance entre les mesures et le nombre de répétitions des mesures par site ne suffit pas à réduire la variance résiduelle qui en découle. Cette hypothèse est

parfaitement réaliste compte tenu de la variabilité spatiale de la structure du sol et de la teneur en matière organique. Le décalage spatial découle à la fois de l'impossibilité de faire toutes les mesures au même point (mesures destructives), et du décalage spatial possible induit par l'imprécision du géoréférencement des mesures entre les différentes phases d'étude. Le nombre de répétitions est très faible, quand ce n'est pas une **mesure unique**. De ce fait, **la structure de la variabilité au sein d'un même site**, difficilement quantifiable en l'absence de réels réplicats. Les différentes propriétés mesurées sur un même site ne portent pas sur les mêmes objets.

Pour le cas précis de l'échantillonnage de sol très localisé pour les analyses physico-chimiques et les mesures des propriétés de l'isoproturon, réaliser un échantillonnage à partir de plusieurs sous échantillons groupés et mélangés ensuite aurait peut être permis de mieux relier les propriétés citées plus-haut aux propriétés hydriques et à la masse volumique apparente. Mais cela n'aurait pas résolu le problème du manque de répétitions pour les propriétés hydriques. Cela n'aurait pas non plus amélioré l'étude des liens entre les propriétés physico-chimiques et les propriétés de l'isoproturon puisque, pour ces propriétés, l « objet-sol » mesuré est le même. Enfin, cela aurait peut être conduit à une réduction de la variabilité spatiale mesurée pour ces propriétés, en passant d'une surface échantillonnée de quelques dm² à quelques m². Une perte d'information sur cette variabilité spatiale peut être critique pour une évaluation correcte des risques de transferts à l'aide d'un modèle mécaniste dont les paramètres sont générés de manière stochastique sur la base de leur distribution. Une bonne estimation des valeurs moyennes comme des valeurs extrêmes est importante (e.g. Coquet *et al.*, 2005a).

<u>Hypothèse 3.b</u> : Il existe un **décalage temporel** entre certaines mesures qui, du fait de l'évolution des propriétés hydriques et des propriétés de structuration du sol sur cet intervalle de temps, empêche de mettre en évidence les liens qui existent entre les propriétés du sol. Cette hypothèse est difficile à évaluer. La plupart des différentes propriétés hydriques du sol ont été mesurées en même temps, sur une période restreinte relativement à la durée de la saison culturale (~1 mois). Il existe par contre un décalage temporel conséquent entre la période d'échantillonnage du sol (pour les propriétés physico-chimiques et les propriétés de l'isoproturon) et les mesures et prélèvements destinés aux propriétés hydriques (4 à 5 mois). Les propriétés de rétention en eau sont importantes pour la cinétique de dégradation des pesticides, leur (hypothétique) variation au cours de la saison culturale est-elle susceptible d'affecter l'interaction sol-isoproturon ? La masse volumique apparente, seule propriété liée à la structure qui a été mesurée, est susceptible d'évoluer au cours de la saison culturale, mais elle a été mesurée en même temps que les propriétés hydriques.

<u>Hypothèse 3.c</u> : Il existe une différence de volume élémentaire représentatif entre les différentes propriétés mesurées. Si la différence de taille entre les objets mesurés est avérée, l'effet de cette différence est difficile à évaluer. Les 50 cm^3 de sol utilisé pour la mesure de la rétention en eau ne correspondent pas aux quelques dm³ de la mesure d'infiltration, ni aux $5 à 10 \text{ cm}^3$ du prélèvement utilisé pour la fraction d'eau immobile, ni aux 100 à 500 cm^3 de la mesures de masse volumique apparente, ni aux 1,5 kg de sols prélevés pour faire les mesure de dégradation, et encore moins au 3390 cm^3 prélevés à la tarière pour la description du sondage.

<u>Hypothèse 3.d</u> : Du fait des **erreurs de mesures, les estimations des propriétés du sol sont trop imprécises**, ce qui introduit une variance/variabilité additionnelle. Aucune analyse de sensibilité de 1^{er} ordre n'a été effectuée sur les différentes propriétés mesurées (à partir des équations qui permettent de les calculer), de manière à étudier la sensibilité des propriétés estimées aux erreurs sur les mesures directes/brutes. En l'état actuel, il n'est pas possible d'estimer précisément les effets des erreurs sur les propriétés estimées. Les sources d'erreur lors des différentes mesures sont par contre généralement connues. Les principales sources d'erreur qui ont pu être identifiées/soupçonnés lors de cette étude sont : (i) l'imprécision de la lecture de la hauteur d'eau écoulée dans le réservoir de l'infiltromètre, et les problèmes possibles de potentiel imposé non-constant du fait des effets du vent sur le vase de Mariotte et sur la stabilité de l'infiltromètre. (ii) La difficulté d'effectuer un prélèvement non-destructif à la gouge sous l'infiltromètre à la fin de l'infiltration ou la différence de masse volumique apparente entre les mesures au cylindre (qui servent à 'corriger' les prélèvements sous l'infiltromètre) et la masse volumique apparente réelle sous l'infiltromètre (inconnue). (iii) Le manque de précision des mesures de quantité d'isoproturon résiduelle au temps final des incubations, lié notamment à une mauvaise estimation des quantités de molécules radiomarquées nécessaires (en partie liée à l'aspect biphasique des cinétiques). (iv) Il est difficile de réaliser des prélèvements de **bonne qualité (non perturbés)** pour les mesures de la relation $\theta(h)$ sur de petits cylindres de sol (plus large que haut). Sur ce point, la qualité des prélèvements semblait néanmoins correcte (comme pour les prélèvements de masse volumique apparente).

<u>Hypothèse 3.e</u>: Une part de l'imprécision des mesures résulte d'une inadéquation entre les 'modèles de processus' simples qui ont été choisi et la 'réalité des processus' plus complexe. Ce type d'erreur, appelé 'erreur structurelle', pose à la fois problème lors de l'estimation des paramètres du modèle avec des données mesurées <u>et</u> lors de l'utilisation des propriétés estimées dans des modèles informatiques de prédiction du comportement des pesticides dans les sols (sur ce dernier point, voir Dubus *et al.*, 2003), avec les mêmes équations. La réalité mesurée n'est pas correctement prise en compte lors de l'estimation des paramètres, puis le modèle informatique échoue à reproduire de manière satisfaisante des mesures réalisées par ailleurs. Quand elle est identifiée, l'erreur structurelle s'apparente au non-respect des hypothèses de base liées aux modèles de processus. Ce problème est évident pour l'estimation de la DT_{50} avec une cinétique de 1^{er} ordre, et il a probablement été aggravé par le faible nombre de temps d'extraction (3) au cours de la cinétique de dégradation.

Il est fort possible que les problèmes d'interprétation des **mesures d'infiltration** soient en partie dus au non-respect des hypothèses des modèles utilisés. Si l'utilisation des équations de Campbell pour décrire la rétention en eau et la conductivité du sol n'est pas problématique (avec 3 mesures de teneur en eau et une conductivité hydraulique, un seul ajustement est possible), il est évident que la forme des courbes $\theta(h)$ et K(h) ne reproduit pas la forme plus complexe des relations réelles. Cresswell et Paydar (1996) ont cependant montré que les erreurs dérivant de cette méthode sont acceptables. La mesure du coefficient d'adsorption avec un modèle linéaire est aussi une simplification par rapport au processus réel mieux reproduit par l'équation de Freundlich. Plusieurs études ont montré que l'adsorption de l'isoproturon s'écarte un peu de la linéarité (N_F < 1 ; e.g. Coquet et Barriuso, 2002).

Il n'est pas possible en l'état actuel de **quantifier la contribution des différentes sources de variabilité 'additionnelle'** qui ont pu nuire à une bonne détermination des relations entre les différentes propriétés mesurées. Il apparaît cependant réaliste que chacune de ces hypothèses a pu contribuer à l'erreur globale.

La stratégie retenue, qui consiste à assurer un nombre de sites (34) et d'échantillons (50) caractérisés conséquent, au prix d'une réduction du nombre de répétitions de mesures pour chaque site, de l'adoption de modèles

simples (avec peu de paramètres à caractériser, facilement mesurables) pour décrire les processus, et d'une caractérisation *a minima* de ces processus (faible nombre de temps d'extraction pour la DT_{50} , avec un nombre limité de pseudo réplicats) contribue probablement à augmenter la variance résiduelle, non explicable par les interactions entre propriétés. Cette stratégie est un échec relatif, mais ce constat à plusieurs conséquences qu'il convient de discuter.

■ 1.2 Répercussions des problèmes rencontrés

L'adoption de la stratégie décrit ci-dessus (et dans l'introduction) avait pour objectif de caractériser de manière satisfaisante la variabilité spatiale des propriétés hydriques du sol et le comportement de l'isoproturon. Le risque étant de sousestimer la variabilité réelle et donc de ne pas rendre compte correctement du comportement de la molécule *in situ* et des transferts. En partant de l'hypothèse (discutable) que le travail réalisé a permis de caractériser le niveau de variabilité spatiale des propriétés, plusieurs points de vue sont alors possibles :

- Il est nécessaire d'augmenter le nombre de mesures réalisées, au bénéfice des répétitions de mesure au sein de chaque site.
- Le compromis entre le nombre de sites caractérisés et le nombre de répétitions par sites n'est pas correct, il faut réduire le nombre de sites caractérisés et augmenter le nombre de répétitions de mesures par sites. Dans ce cas, y a-t-il un risque de sous estimer la variabilité spatiale des propriétés ?

De fait des moyens et du temps disponible, le **nombre de mesures** qu'il est possible de réaliser est classiquement le **principal facteur limitant**. C'est donc la deuxième question qu'il faut examiner.

Cette question en soulève une autre, que des générations de pédologues se sont posées : **combien de répétitions faut-il pour caractériser correctement le centrage (moyenne) et la dispersion (variance) des propriétés mesurées ?** Si l'on se réfère à Warrick et Nielsen (1980), concernant l'estimation de la <u>moyenne</u>, la réponse est 2 pour la masse volumique apparente, 50 à 150 pour la granulométrie, 60 à 100 pour les propriétés de rétention en eau et 1300 (!) pour la conductivité hydraulique.

Les 50 couches/échantillons du travail présenté ici, réparties sur la surface et la profondeur de l'horizon de surface du secteur agricole seraient donc à peine satisfaisantes pour caractériser la granulométrie et les propriétés de rétention en eau du sol, et tout à fait insatisfaisantes pour caractériser la conductivité hydraulique. Le nombre d'échantillons nécessaires dépend en fait de la surface du secteur étudié et de la structure de la variabilité spatiale de la propriété d'intérêt (portée et palier du semivariogramme), et il est donc difficile de savoir ou se situe la taille 'idéale' de l'échantillon.

La question du nombre d'échantillons doit aussi être tranchée du point de vue statistique : **Quel est le nombre minimum de sites qu'il faut caractériser pour disposer de tests statistiques robustes (régressions, analyse de la variance...)?** Lorsque les propriétés sont catégorielles, il est aussi nécessaire de disposer d'un nombre de mesures par modalité satisfaisant. Enfin, un échantillonnage de taille trop réduite limite les possibilités de validation croisée, par l'utilisation de méthodes comme le *Jackknife*, et plus encore pour un 'vrai' échantillon de validation indépendant.

La comparaison des valeurs mesurées sur le secteur agricole avec les mesures effectuées sur la parcelle d'étude par Alletto *et al.* (2006) ou par Millot (2004) montre que les valeurs sont étonnamment proches par leurs moyennes, (carbone organique, K_{SAT} , K_D , DT_{50}), mais les études à la parcelle sous-estiment

généralement la variabilité (le nombre de mesures est aussi plus faible). **Cela signifiet-il que des mesures à l'échelle d'une parcelle sont suffisantes pour caractériser le secteur agricole de Ouarville ?** La question est importante car, si la parcelle n'est pas a proprement parler un secteur de référence, elle a été sélectionnée sur les mêmes critères qu'un secteur de référence (hypothèse de représentativité vis-à-vis de la diversité et de la répartition spatiale de la couverture pédologique).

D'un **point de vue pédologique** il est assez clair que **le choix de cette parcelle était pertinent**. La plupart des matériaux géo-pédologiques du secteur y sont représentés, et leur répartition à une échelle allant jusqu'à la 100^{aine} de mètres est caractéristique de ce qui s'observe à l'échelle du secteur agricole complet. Elle n'est pas pertinente pour étudier les règles de répartition des sols dans le paysage, mais ces règles ne sont pas plus apparentes à l'échelle du secteur agricole complet.

Comme les seules propriétés comparées sont celles de l'horizon de surface, et que les analyses statistiques ont montré que cet horizon de surface avait des propriétés pédologiques peu contrastées à l'échelle du secteur agricole, on peut par contre se demander si l'adéquation entre les propriétés mesurées à la parcelle et celles mesurées à l'échelle du secteur agricole n'est pas fortuite.

Cette question est légitime dans la mesure où la parcelle ne représente pas la diversité des pratiques agronomiques dans le secteur étudié. Ces pratiques influencent les propriétés de l'horizon de surface (carbone organique et structure notamment), et les tests statistiques ont montré que certaines de ces propriétés influencent les propriétés hydriques du sol et le comportement de l'isoproturon dans ces sols.

2 Conclusion générale

Le travail présenté dans ce document a concerné la mise en œuvre d'une stratégie d'évaluation de la variabilité spatiale des propriétés du sol, à l'échelle d'un secteur agricole de 2600 ha, en relation avec leur impact potentiel sur le comportement de l'isoproturon dans ces sols. La mise en évidence des facteurs agronomiques et pédologiques qui influencent le comportement de l'isoproturon – ou plus exactement le risque de voir cette molécule transportée par l'eau au travers du sol vers la nappe – est une étape clé pour définir ensuite les zones 'à risque' pour ces transferts.

L'évaluation des risques de transferts par l'utilisation de modèles informatiques mécanistes, qui doit suivre ce travail, est un moyen essentiel de compréhension des phénomènes. Par le couplage des processus, elle apporte une vision synthétique et globale qui ne peut être mise en œuvre par l'examen individuel des propriétés du sol. Mais cette approche est lourde à mettre en œuvre et coûteuse. Le pari de ce travail était donc de réaliser une évaluation '*a minima*' des propriétés du sol, tout en restant dans le cadre 'mécaniste' de processus biologiques, physiques et chimiques intégrés dans les modèles, en utilisant des jeux d'équations relativement simples à paramétrer. La contrepartie attendue du choix de modèles de processus simples est la possibilité de multiplier les mesures et, par-là, de mieux évaluer la variabilité spatiale des propriétés les plus critiques. La stratégie d'échantillonnage mise en œuvre et les méthodes de mesures employées avaient pour but de capturer au mieux la variabilité spatiale des propriétés du sol essentielles pour ces transferts.

La première question posée dans les objectifs de cette thèse est « quel est le niveau de variabilité spatiale des processus étudiés ? ». Les mesures ont révélé

que le niveau de variabilité spatiales des propriétés agronomiques (carbone organique) et pédologiques (teneurs en argile, en CaCO₃, etc.) du sol de surface sont relativement faibles, si l'on excepte la masse volumique apparente. Le contexte géo-pédologique présente une gamme de matériaux contrastés qui – après d'importants remaniements par des phénomènes périglaciaires – se répartissent dans le paysage selon de règles bien difficiles à décrypter. Malgré le nombre d'intergrades des matériaux parentaux (se distinguant par leurs teneurs en argile et par la nature et l'abondance des éléments grossiers), l'horizon de surface reste relativement homogène. Il semblerait que les phénomènes de mélange qui ont pu survenir décroissent vers la surface, si bien que les sols de surface sont essentiellement dérivés du limon des plateaux, d'où la relative homogénéité de ces horizons cultivés. De même, malgré des différences de modalité de travail du sol dans le secteur étudié, les teneurs en carbone de surface ne sont pas très contrastées. Si les propriétés de rétention en eau du sol sont peu à moyennement variables, la conductivité hydraulique au voisinage de la saturation et la fraction d'eau immobile s'avèrent éminemment variables, comme c'est généralement le cas. Les mesures quantitatives permettant de décrire la structure du sol – propriété qui pourrait expliquer une telle variabilité de la conductivité – manquent. On décèle un effet de la masse volumique apparente sur les propriétés hydriques du sol, mais celui-ci est modéré. L'adsorption de l'isoproturon a une variabilité spatiale moyenne, à l'image de la teneur en carbone organique dont elle dépend beaucoup. Le temps de demi-vie de dégradation de l'isoproturon a une variabilité spatiale très importante. Comme pour la conductivité hydraulique à saturation, les propriétés agro-pédologiques qui pourraient expliquer ce niveau de variabilité n'apparaissent pas, ou n'ont pas été mesurées.

Ces constats nous amènent sur la deuxième question à laquelle cette thèse doit répondre : « parmi les propriétés du sol mesurées et les paramètres agronomiques pris en compte, lesquels sont déterminants pour les processus étudiés ? ». L'étude statistique des relations entre les propriétés mesurées a montré que beaucoup de propriétés agronomiques ou pédologiques du sol ont un lien, et peutêtre une influence, sur les propriétés hydriques du sol et sur sa réactivité vis-à-vis de l'isoproturon. On décèle globalement deux grandes catégories de sol dont l'horizon de surface se distingue par ses propriétés hydriques ou par ses propriétés d'adsorption et de dégradation de l'isoproturon. La première catégorie est celle des sols peu profonds 'à ambiance carbonatée'. Ils ont un horizon de surface avec des teneurs en argile. carbonates et éléments grossiers plus élevées, ainsi qu'un pH neutre ou légèrement basique. Ces sols occupent une faible surface dans le secteur étudié, ce sont généralement des RENDISOLS, des CALCOSOLS ou des CALCISOLS. La seconde catégorie est celle des sols moyennement profonds à profonds. Ils ont inversement un horizon de surface avec des teneurs en argile, carbonates et éléments grossiers plus faibles, ainsi qu'un pH neutre ou légèrement acide, et ils occupent une surface importante. Les analyses en composantes principales révèlent que les 'sols peu profonds' sont globalement plus organiques ; ils ont une réserve utile et une fraction d'eau immobile plus faible, une conductivité à saturation plus élevée et un K_{OC} plus faible. La vitesse de dégradation de l'isoproturon y est apparemment plus élevée (DT_{50} plus faible). Ce constat intéressant est balayé par la réalité géologique, pédologique et agronomique qui fait que les sols 'typiques' décrits ci-dessus deviennent sur le terrain des intergrades, présentant un degré de rattachement variable avec les 'sols types'. Conséquence logique, il s'avère impossible de créer des classes de pédotransfert 'fiables' sur la base des relations entre les propriétés de base du sol (teneur en argile, CaCO₃, éléments grossiers, etc.) et les propriétés d'intérêt (rétention en eau, K_{SAT} , K_{OC} , DT_{50}). Le constat est le même pour les fonctions de pédotransfert qui ont été élaborées et testées : l'erreur de prédiction est trop élevée pour que la prédiction des propriétés d'intérêt soit possible. Seule une prédiction du

K_D est envisageable, basée sur les teneurs en carbone organique, en éléments grossiers et en limon du sol, et éventuellement ses teneurs en eau caractéristiques à pF 2 et pF 4,2.

Les constats sont les mêmes pour les effets des pratiques agronomiques sur les propriétés importantes dans les processus de transferts. Les échantillons des lits de semence des parcelles en travail simplifié sont plus riches en carbone organique. La distinction entre le lit de semence et le reste de l'horizon travaillé est importante, notamment pour les propriétés hydriques du sol. Le lit de semence a une réserve utile et une teneur en eau immobile plus faible, et une conductivité hydraulique à saturation plus élevée. Sa masse volumique apparente est bien sur plus faible. Les sols en travail simplifié semblent dégrader un peu plus vite l'isoproturon. Mais ces distinctions ne permettent pas de prédire les propriétés hydriques du sol, du fait de la grande variabilité des propriétés au sein de chacune des catégories distinguées (stratification verticale, modalité de travail du sol).





- **figure 94** Diagramme 'équi-moyens' d'arbitrage du rapport 'nombre de sites' / 'nombre de répétitions par sites' / 'complexité des modèles' de l'étude de la variabilité spatiale de propriétés du sol mesurées sur des supports différents, pour une surface, un milieu pédologique et un contexte agronomique de complexité donnée.
 - Ou « le dilemme de l'hydropédologue »

Avec 'puissance statistique', la puissance des tests, modèles et validations statistiques, qui augmente avec le nombre de sites caractérisés ; 'complexité des modèles', la complexité des modèles physiques ou chimiques de processus <u>et</u> la résolution de la représentation de la couverture pédologique ; les 'moyens' sont les moyens matériels, financiers et humains, et le temps disponibles ; la complexité du milieu comprend notamment le niveau et la structure des variations des propriétés dans l'espace.

La question suivante posée au début du manuscrit de thèse, qui était « **parmi les processus étudiés, lesquels pourraient être prépondérants**, au vu de leur intensité et de leur variabilité spatiale, **dans les transferts de l'isoproturon à l'échelle du secteur agricole étudié** ? » a une réponse tout aussi nuancée que la précédente. Il existe des antagonismes entre les propriétés des 'sols types' présentés ci-dessus. Si l'on prend le cas des 'sols peu profonds à ambiance carbonatée', ils sont peu épais, souvent caillouteux, ont une réserve utile plus faible, un K_{OC} plus faible et une conductivité hydraulique à saturation plus élevée. Ces critères sont favorables aux transferts de pesticides au travers du sol, <u>mais</u> ces sols ont aussi une vitesse de dégradation plus élevée, une teneur en eau immobile plus faible et un teneur en carbone organique plus élevée (ce qui augmente mécaniquement le K_D), ce qui réduit les risques de transfert. **Seul un travail de modélisation permettrait de détermine**

les effets qui sont prépondérants sur les risques de transferts de l'isoproturon.

En conclusion (1) les sols de surface du secteur agricoles de Ouarville sont peu contrastés du point de vue de leurs propriétés agronomiques et pédologiques; (2) certaines propriétés cruciales pour le comportement de l'isoproturon sont néanmoins très variables; (3) si l'on parvient à identifier certains de leur déterminismes (facteurs agro-pédologiques), ces déterminismes sont, à l'exception notoire du $K_{D,}$ trop peu marqués pour permettre de prédire les propriétés du sol importantes pour les transferts de pesticides à partir de ses propriétés de base. (4) Enfin, les propriétés du sol importantes pour les transferts de pesticides ont parfois des effets antagonistes sur les risques de transferts.

La prédiction spatiale des risques de transferts de pesticides <u>à partir d'une</u> <u>carte des propriétés pédologiques du sol</u> ne semble donc pas possible. Une prédiction du K_D à partir d'une <u>carte des teneurs en matières organiques</u> est par contre envisageable.

La dernière question à laquelle doit répondre cette thèse a pour but d'apporter un éclairage sur les raisons de l'échec relatif exposé ci-dessus : « quelles sont les conséquences du choix méthodologique privilégiant l'estimation de la variabilité spatiale au détriment de la complexité des processus suivis ». Ces conséquences ont été largement discutées dans le chapitre précédent (discussion), elles sont synthétisées par la figure 94 ci-dessus.

Le fait est que les moyens dont disposent les études portant sur des problèmes agro-environnementaux liés au sol sont généralement <u>le</u> facteur limitant, notamment du fait des limites méthodologiques à la connaissance des sols, qui ont été exposées en introduction de ce document. La complexité du milieu naturel en général et des sols en particulier est aussi un invariant avec lequel il faut composer.

Il n'est pas toujours possible de mesurer toutes les propriétés du sol sur un seul et même prélèvement, ou sur un seul et même point de mesure (appelé ici 'site'). Or, si certaines propriétés du sol varient à courte distance (sa structure dans l'horizon labouré par exemple), la différence de support de mesure engendre une variabilité supplémentaire, parasite, qui masque une partie des liens existant entre les propriétés mesurées.

La solution la plus évidente consiste à réduire le nombre de sites caractérisés, afin d'augmenter le nombre de répétitions de chaque mesure pour un même site, afin de compenser la variabilité locale – les moyens, et donc le nombre de mesures étant un invariant. La baisse du nombre de sites caractérisés engendre à son tour une réduction de la puissance des méthodes statistiques employées, notamment si le nombre de sites caractérisés est faible.

Mais si on ne peut réduire le nombre de sites caractérisés, et qu'il faut augmenter le nombre de répétitions, il est encore possible d'utiliser des modèles de processus plus simples, qui demandent moins de mesures pour être calibrés. C'est la stratégie qui a été retenue pour cette thèse, et nous avons vu qu'elle peut engendrer à son tour une variabilité supplémentaire - du fait de l'inadéquation entre les modèles et la réalité - qui masque elle aussi une partie des relations entre propriétés.

Mais l'optimum présenté sur la figure 94 existe-t-il toujours ? Ou y a-t-il des situations pour lesquelles une approche spatialisée de certaines propriétés du sol n'est pas possible ?

Références bibliographiques

- AFES, 1995. Référentiel pédologique principaux sols d'Europe. INRA éd., col. *Techniques et Pratiques*, Paris, 332 p., ISBN : 2-7380-0633-7.
- AFNOR, 1995(a). NF ISO 10693 / NF X31-105. Qualité du sol Détermination de la teneur en carbonate Méthode volumétrique. Thème : *Propriétés chimiques des sols*. Juin. 12 p.
- **AFNOR**, 1995(b). NF ISO 10694 / NF X31-409. Qualité du sol Dosage du carbone organique et du carbone total après combustion sèche (analyse élémentaire). Thème : *Propriétés chimiques des sols*. Juin. 12 p.
- **AFNOR**, 1995(c). NF ISO 13878 / X31-418. Qualité du sol Détermination de la teneur totale en azote par combustion sèche ("analyse élémentaire"). Thème : *Propriétés chimiques des sols*. Juillet. 12 p.
- AFNOR, 1998(a). NF ISO 11272 / X 31-556. Qualité du sol Détermination de la masse volumique apparente sèche. Septembre. 15 p. *In* AFNOR, 1999. Qualité des Sols. Vol 1 & 2. col. *Recueil Normes*, Paris. 408 et 566 p.
- AFNOR, 1998(b). NF X31-003. Qualité du sol Description du sol. Thème: *Qualité du sol et pédologie en général*. Décembre. 60 p.
- AFNOR, 2003. NF X31-107. Qualité du sol Détermination de la distribution granulométrique des particules du sol - Méthode à la pipette. Thème: *Propriétés physiques des sols*. Septembre. 20 p.
- AFSSA DIVE, 2007. AGRITOX Base de données sur les substances actives phytopharmaceutiques. (Isoproturon). Site internet, http://www.dive.afssa.fr/agritox, dernier accès octobre 2007.
- **AHMAD R., NELSON P.N. & KOOKANA R.S.**, 2006. The molecular composition of soil organic matter as determined by ¹³C NMR and elemental analyses and correlation with pesticide sorption. *European Journal of Soil Science*, 57, pp. 883--893.
- AILLOT B. & VERBEQUE B., 1995. Les terres de Beauce Typologie des sols. Chambres d'Agricultures d'Eure-et-Loir, du Loiret et du Loir-et-Cher. 52 p.
- AILLIOT B. & SALLÉ S., 2003. Plan d'action de ouarville état des travaux mars 2003. Chambre d'Agriculture d'Eure-et-Loir. Travaux financés par le Conseil Régional Centre, le Conseil Général, les Agences de l'eau Loire-Bretagne et Seine-Normandie, le BRGM et Bayer Crop Science dans le cadre du GREPPPES. 20 p. + annexes.
- ALLETTO L., 2004. Dissipation des pesticides à l'échelle de la parcelle agricole Étude des mécanismes d'adsorption - dégradation et de transport de l'isoproturon sur une parcelle agricole hétérogène de la Beauce. *Rapport de DEA National de Science du Sol*. UMR, EGC (INA-PG/INRA), Thiverval-Grignon. 20 pp.
- ALLETTO L., COQUET Y., BENOIT, P. & BERGHEAUD V., 2006(a). Effects of temperature and water content on degradation of isoproturon in three soil profiles. *Chemosphere* 64:7 pp. 1053-1061.
- ALLETTO L., COQUET Y., VACHIER P. & LABAT C., 2006(b). Hydraulic conductivity, immobile water content, and exchange coefficient in three soil profiles. *Soil Science Society of America Journal*, 70:4 pp. 1272-1280.
- VAN ALPHEN B.J. & STOORVOGEL J.J., 2002. Effect of soil variability and weather conditions on pesticide leaching – a farm level evaluation. *Journal of Environmental Quality* 31 pp. 797-805.
- ANGULO-JARAMILLO R., GAUDET J.P., THONY J.L. & VAUCLIN M., 1996. Measurement of hydraulic properties and mobile water content of a field soil *Soil Science Society of America Journal*, 60, 710–715.
- ANGULO-JARAMILLO R., MORENO F., CLOTHIER B.E., THONY J.L., VACHAUD G., FERNANDEZ-BOY E.
 & CAYUELA J.A., 1997. Seasonal variation of hydraulic properties of soils measured using a tension disc infiltrometer. *Soil Science Society of America Journal*, 61, 27–32.

- ANGULO-JARAMILLO R., VANDERVAERE J., ROULIER S., THONY J., GAUDET J. & VAUCLIN M., 2000. Field measurement of soil surface hydraulic properties by disc and ring infiltrometers: A review and recent developments. *Soil and Tillage Research*, 55, pp. 1–29.
- ANKENY M.D., AHMED M., KASPAR T.C., HORTON R., 1991. Simple field method for determining unsaturated hydraulic conductivity. *Soil Science Society of America Journal*, 55(2), pp. 467-470.
- **ANTEA**, 1999. Carte piézométrique de la nappe des calcaires de beauce sur le bassin versant de ouarville.
- ARVALIS, APCA, FFCAT, FNA, FNSEA, IN VIVO, JEUNES AGRICULTEURS, MINISTÈRE DE L'AGRICULTURE, DE L'ALIMENTATION, DE LA PÊCHE ET DES AFFAIRES RURALES, UIPP, COUMA-AFPP. 2003. Isoproturon, Chlortoluron – Nouvelle dose d'emploi. Note d'information commune. 2 p.
- AYLMORE L.A.G. & DI H.J., 2000. Predicting the probability of groundwater contamination by pesticides under variable recharge. *Australian Journal of Soil Research*, 38 pp. 591-602.
- **BAIZE D., JABIOL B.**, 1995. Guide pour la description des sols. *INRA, col. Techniques et pratiques.* 375. p.
- **BANTON O.**, 1993. Filed- and laboratory-determined hydraulic conductivities considering anisotropy and core surface area. *Soil Science Society of America Journal*, 57, pp. 10–15.
- BARRIUSO E. & BENOÎT P., 2006. State-of-the-art review on bound residues. Report DL#5 of the FP6 EU-funded *FOOTPRINT project*, <www.eu-footprint.org>, 79 p.
- BASCOMB C.L. & JARVIS M.G., 1976. Variability in 3 areas of denchworth soil map unit .1. Purity of map unit and property variability within it. *Journal of Soil Science*, 27:3, pp. 420-437. (*cité par Vauclin, 1982*)
- **BASTET G.**, 1999. Estimation des propriétés de rétention en eau des sols à l'aide de fonctions de pédotransfert : développement de nouvelles approches. *Thèse Université d'Orléans*, 214 p. (*cité par Morvan et al. 2004*)
- BAVEYE P., JACOBSON A.R., ALLAIRE S.E., TANDARICH J.P. & BRYANT R.B., 2006. Whither goes soil science in the United States and Canada? *Soil Science*, 171:7, pp. 501-518.
- **BECK A.J., JONES K.C.**, 1996(a). The effects of particle size, organic matter content, crop residues and dissolved organic matter on the sorption kinetics of atrazine and isoproturon by clay soil. *Chemosphere*, 32:12, pp. 2345-2358.
- **BECK A.J., HARRIS G.L., HOWSE K.R. JOHNSTON A.E. & JONES K.C.**, 1996(b). Spatial and temporal variation of isoproturon residues and associated sorption/desorption parameters at the field scale. *Chemosphere*, 33, pp. 1283-1295.
- **BENDING G.D., LINCOLN S.D. & EDMONDSON R.N.**, 2006. Spatial variation in the degradation rate of the pesticides isoproturon, azoxystrobin and diflufenican in soil and its relationship with chemical and microbial properties. *Environmental Pollution*, 139, pp. 279-287.
- **BENDING G.D. & RODRIGUEZ-CRUZ M.S.**, 2007. Microbial aspects of the interaction between soil depth and biodegradation of the herbicide isoproturon. *Chemosphere*, 66, pp. 664-671.
- **BERGER B.M.**, 1999. Factors influencing transformation rates and formation of products of phenylurea herbicides in soil. *Journal of Agricultural And Food Chemistry*, 47, pp. 3389-3396.
- **BEULKE S. ET BROWN C.D.**, 2001. Evaluation of methods to derive pesticide degradation parameters for regulatory modelling. *Biology and Fertility of Soils*, 33, pp. 558-564.
- **BEULKE S., VAN BEINUM W., BROWN C.D., MITCHELL M. & WALKER A.**, 2005. Evaluation of Simplifying Assumptions on Pesticide Degradation in Soil. *Journal of Environmental Quality*, 34, pp. 1933-1943.
- BLACKSHAW R.E., O'DONOVAN J.T., HARKER K.N., CLAYTON G.W. ET STOUGAARD R.N., 2006. Reduced herbicide doses in field crops: A review. *Weed Biology and Management*, 6, pp. 10–17.
- BLANCO M., COELLO J., ITURRIAGA H., MASPOCH S. & PAGES J., 2000. NIR calibration in nonlinear systems: different PLS approaches and artificial neural networks. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 50, pp. 75-82.

- BOIVIN A., CHERRIER R. & SCHIAVON M., 2006. A comparison of five pesticides adsorption and desorption processes in thirteen contrasting field soils. *Chemosphere*, 61, pp. 668-676.
- BOSCH D.D. & WEST L.T., 1998. Hydraulic conductivity variability for two sandy soils. *Soil Science Society of America Journal*, 62, pp. 90–98.
- **BOURAOUI F.**, 2007. Testing the PEARL model in the Netherlands and Sweden. *Environmental Modelling & Software*, 22, pp. 937-950.
- BOUYER J., 1996. Méthodes statistiques médecine Biologie. *ESTEM, éd. INSERM*. 351 pp. ISBN : 2-909455-74-2.
- BRONICK C.J. & LAL R., 2005. Soil structure and management: a review. *Geoderma*, 124, pp. 3-22.
- **BROOKS & COREY**, 1964. Hydraulic properties of porous media. Colorado State University, Fort Collins, USA. *Hydrology paper*, 3.
- BRUAND A., FERNANDEZ P.P. & DUVAL O., 2003. Use of class pedotransfer functions based on texture and bulk density of clods to generate water retention curves. *Soil Use and Management*, 19, pp. 232-242
- BRUCKLER L., BERTUZZI P., ANGULO-JARAMILLO R. & RUY S., 2002. Testing an Infiltration Method for Estimating Soil Hydraulic Properties in the Laboratory. *Soil Science Society of America Journal*, 66, pp. 384-395.
- BUCKINGHAM E., 1907. Studies on the movement of soil moisture. Bull. 38. USDA, Bureau of Soils, Washington D.C. (*cité par Kutílek et Nielsen, 1994*)
- **CABINET VEILLAUX**, 2000. Carte pédologique en vue d'un plan d'action pour la réduction de la pollution par les phytosanitaires : secteur de ouarville. Chambre d'Agriculture d'Eure-et-Loir (maître d'œuvre). Carte + notice, échelle 1/10000^e.
- **CALVET R.**, 2003. Le Sol. Propriétés et fonctions. Tome 1 : Constitution et structure, phénomènes aux interfaces. *Éd. France Agricole*, Dunod, 456 p.
- **CALVET R.**, 2005. Les pesticides dans le sol Conséquences agronomiques et environnementales. *Éd. France Agricole*, col. Référence scientifique. 637 p.
- CALVET R., BARRIUSO E. & DUBUS I.G., 2007. Application of two surface complexation models to the adsorption of weak organic acids by soil: an additive approach. *European Journal of Soil Science*, 58, pp. 609-624.
- **CAMERON D.R.**, 1978. Variability of soil water retention curves and predicted hydraulic conductivities on a samll plot. Soil Science, 129, pp. 364–371. (cité par Vauclin 1982)
- CAMPBELL, 1974. A simple-method for determining unsaturated conductivity from moisture retention data. *Soil Science* 117:6. pp. 311-314.
- CASEY F.X.M., LOGSDON S.D., HORTON R. & JAYNES D.B., 1997. Immobile water content and mass exchange coefficient of a field. *Soil Science Society of America Journal*, 61, pp. 1030–1036.
- CASSEL D.K. ET BAUER A., 1975. Spatial variability in soils below depth of tillage : bulk density and 15 atmosphere percentage. *Soil Science Society of America Proceeding*, 39, pp. 247– 250. (*cité par Vauclin 1982*)
- **CENTRAL SCIENCE LABORATORY**, 2007. Pesticide Usage Statistics. http://pusstats.csl.gov.uk/. *Pesticide Usage Survey*: http://www.csl.gov.uk/aboutCsl/scienceGroupsAndTeams/fsg/-pesticides/pusTeam.cfm. (accès novembre 2007)
- CHARNAY M.P., TUIS S., COQUET Y. & BARRIUSO E., 2005. Spatial variability in C-14-herbicide degradation in surface and subsurface soils. *Pest Management Science*, 61, pp. 845-855.
- CHEVALLIER T., VOLTZ M., BLANCHART E., CHOTTE J.L., ESCHENBRENNER V., MAHIEU M. & ALBRECHT A., 2000. Spatial and temporal changes of soil C after establishment of a pasture on a long-term cultivated vertisol (Martinique). *Geoderma*, 94, pp. 43-58.
- CHIN W.W., MARCOLIN B.L. & NEWSTED P.R., 1996. A Partial Least Squares Latent Variable Modeling Approach For Measuring Interaction Effects: Results From A Monte Carlo Simulation Study And Voice Mail Emotion/Adoption Study. *Proceedings of the 17th International Conference On Information Systems*. DeGross J.I., Jarvenpaa S. & Srinivasan

A. (éds) December 16-18, Cleveland, Ohio, USA. http://disc-nt.cba.uh.edu/chin/icis96.pdf>

- CHONG I. & JUN C., 2005. Performance of some variable selection methods when multicollinearity is present. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 78, pp. 103-112.
- CIPRA J.E., BIDWELL D.A., WHITNEY D.A., FEYERHERM A.M., 1972. Variation with distance in selected fertility measurement of pedons of Western Kansas Ustoll. *Soil Science Society of America Journal*, 36, pp. 111–118. (cité par Vauclin 1982)
- CLAUSEN L., FABRICIUS I. & MADSEN L., 2001. Adsorption of pesticides onto quartz, calcite, kaolinite, and alpha-alumina. *Journal of Environmental Quality*, 30, pp. 846-857.
- CLAUSEN L. & FABRICIUS I., 2001. Atrazine, Isoproturon, Mecoprop, 2,4-D, and Bentazone Adsorption onto Iron Oxides. *Journal of Environmental Quality*, 30, pp. 858-869.
- **CLOTHIER B.E. & SMETTEM K.R.J.**, 1990. Combining laboratory and field measurements to define the hydraulic properties of soil. *Soil Science Society of America Journal*, 54, pp. 299-304.
- CLOTHIER B.E., KIRKHAM M.B. & MCLEAN J.E., 1992. In situ measurements of the effective transport volume for solute moving through soil. *Soil Science Society of America Journal*, 56:733–736.
- CLOTHIER B.E., HENG L.K., MAGESAN G.N. & VOGELER I, 1995. The measured mobile-water content of an unsaturated soil as a function of hydraulic regime. *Australian Journal of Soil Research*, 33, pp. 397–414.
- **COATS K. & SMITH B.**, 1964. Dead end pore volume and dispersion in porous media. *Society of Petroleum Engineers Journal*, 4, pp. 73–84.
- CONNOLLY R.D., 1998. Modelling effects of soil structure on the water balance of soil-crop systems: a review. *Soil & Tillage Research*, 48, pp. 1-19.
- COOKE C.M., SHAW G. & COLLINS C.D., 2004. Determination of solid-liquid partition coefficients (Kd) for the herbicides isoproturon and trifluralin in five UK agricultural soils. *Environmental Pollution*, 132, pp. 541-552.
- **COQUET Y., BOUCHER A., LABAT C., VACHER P. ET ROGER-ESTRADE J.**, 2000. Caractérisation hydrodynamique des sols à l'aide de l'infiltromètre à disque Aspects théoriques et pratiques. *Étude et Gestion des Sols*, 7:1, pp. 7–24.
- **COQUET Y., ROGER-ESTRADE J., BOUCHER A., LABAT C. & VACHIER P.**, 2001. Intérêt d'une compartimentation morphologique du profil cultural pour l'étude de l'infiltration de l'eau dans les couches de sol travaillées Premiers résultats. *Étude et Gestion des Sols*, 8:1, pp. 19-31.
- **COQUET Y. & BARRIUSO E.**, 2002. Spatial variability of pesticide adsorption within the topsoil of a small agricultural catchment. *Agronomie*, 22, pp. 389-398.
- **COQUET Y.**, 2003. Sorption of Pesticides Atrazine, Isoproturon, and Metamitron in the Vadose Zone. *Vadose Zone Journal*, 2, pp. 40-51.
- COQUET Y., DESBOURDES-COUTADEUR C., VACHIER P., ŠIMŮNEK J., & ROGER-ESTRADE J., 2004. Influence de la variabilité spatiale de la structure des sols cultivés sur les transferts de l'eau et de l'ion bromure. *Étude et Gestion des Sols*, 11:1, pp. 81–92.
- COQUET Y., HADJAR D., GILLIOT J.M., CHARNAY M.P., MOEYS J., DUFOUR A. & BEAUDOIN N., 2005(a). Biases in the spatial estimation of pesticide loss to groundwater. *Agronomy For Sustainable Development*, 25, pp. 465-472.
- COQUET Y., VACHIER P., LABAT C., 2005(b). Vertical variation of near-saturated hydraulic conductivity in three soil profiles. *Geoderma*, 126:3-4, pp. 181-191.
- **COQUET Y., VAUDOUR E., COUSIN I., NICOULLAUD B., ANGULO-JARAMILLO R.**, 2006. Projet de Recherche ESHEL – Caractérisation du risque de contamination de la nappe de Beauce par les pesticides : Elucidation des mécanismes du transport préférentiel et approche spatiale du risque à l'échelle du bassin hydrologique – Rapport intermédiaire sur l'avancement du projet de recherches. *Programme MEDD « Evaluation et réduction des risques liés à l'utilisation des pesticides »*, INA-PG, INRA, LTHE. 54 pp.
- COUSIN I., NICOULLAUD B. & COUTADEUR C., 2003. Influence of rock fragments on the water retention and water percolation in a calcareous soil. *Catena*, 53, pp. 97-114.
- COUTADEUR C., COQUET Y. & ROGER-ESTRADE J., 2002. Variation of hydraulic conductivity in a tilled soil. *European Journal Of Soil Science*, 53, pp. 619-628.
- **CPCS** (Commission de Pédologie et de Cartographie des Sols), 1967. Classification des Sols. Travaux CPCS 1963-1976. Polycopié, 67 p.
- **CRAWFORD J.W.**, 1994. The relationship between structure and the hydraulic conductivity of soils. *European Journal of Soil Science*, 45, pp. 493–502.
- **CRESSWELL H.P. ET PAYDAR Z.**, 1996. Water retention in Australian soils. 1. Description and prediction using parametric functions. *Australian Journal of Soil Research*, 34, pp. 195-212.
- **CRESSWELL H.P., COQUET Y., BRUAND A. ET MCKENZIE N.J.**, 2006. The transferability of Australian pedotransfer functions for predicting water retention characteristics of French soils. *Soil Use and Management*, 22, pp. 62–70.
- DARCY H., 1856. Les fontaines publiques de la ville de dijon Exposition et application des principes à suivre et des formules à employer dans les questions de distribution d'eau -Ouvrage terminé par un appendice relatif aux fournitures d'eau de plusieurs villes, au filtrage des eaux et à la fabrication des tuyaux de fonte, de plomb, de tole et de bitume. Par Henry Darcy, Inspecteur Général des Ponts et Chaussées. *Victor Dalmont, Éd.*, Paris. Référence consultable [http://www.cig.ensmp.fr/~hydro/BIB/darcy/loi_de_darcy.htm].
- **DE ALBA S., LINDSTROM M., SCHUMACHER T.E. & MALO D.D.**, 2004. Soil landscape evolution due to soil redistribution by tillage: a new conceptual model of soil catena evolution in agricultural landscapes. *Catena*, 58, pp. 77-100.
- **DELMAS M.**, 2007. Evaluation d'une carte pédologique à moyenne échelle. *Mémoire de Master, STV, parcours "Sols: Organisation, fonctionnement et gestion"*, Université Piere et Marie Curie, AgroParisTech, Paris. 43 p. + annexes.
- **DESCHAMPS C.**, 1999. Protéger et restaurer la qualité des eaux souterraines en Beauce : le bassin versant de Ouarville. Mémoire de Fin d'Études de l'Institut National Agronomique Paris-Grignon.
- DODGE Y., 2003. Premiers pas en statistique. Éd. Springer-Verlag France, 427 p.
- **DUBUS I.G., BROWN C.D. & BEULKE S.**, 2003. Sources of uncertainty in pesticide fate modelling. *The Science of the Total Environment*, 317, pp. 53-72.
- **E.E.A.**, 2004. Digital elevation model of europe : hillshade 1 km x 1 km, raster data. *European Environmental Agency*.
- ELKHATTABI K., BOUHAOUSS A., PERRIN-GANIER C. & SCHIAVON M., 2004. Fate of isoproturon in two Moroccan soils. *Agronomie*, 24, pp. 177-183.
- EL-SEBAI T., LAGACHERIE B., COOPER J.F., SOULAS G. & MARTIN-LAURENT F., 2005. Enhanced isoproturon mineralisation in a clay silt loam agricultural soil. *Agronomy For Sustainable Development*, 25, pp. 271-277.
- ERTLI T., MARTON A. & FOLDENYI R., 2004. Effect of pH and the role of organic matter in the adsorption of isoproturon on soils. *Chemosphere*, 57, pp. 771-779.
- VAN ES H., OGDEN C., HILL R., SCHINDELBECK R. & TSEGAYE T., 1999. Integrated Assessment of Space, Time, and Management-Related Variability of Soil Hydraulic Properties. *Soil Science Society of America Journal*, 63, pp. 1599-1608.
- FAO, 1998. World reference base for soil resources. *World Soil Resources Reports* n[®]4. ISSS, ISRIC. 109 p. http://www.fao.org/docrep/W8594E/W8594E00.htm>
- **FLURY M.**, 1996. Experimental evidence of transport of pesticides through field soils A review. *Journal of Environmental Quality*, 25, pp. 25–45.
- **FOOTPRINT**, 2007. The FOOTPRINT Pesticide Properties DataBase. (Isoproturon). Database collated by the University of Hertfordshire as part of the EU-funded FOOTPRINT project (FP6-SSP-022704). Site internet http://www.eu-footprint.org/ppdb.html, dernier accès octobre 2007.

- GAJEM Y.M., WARRICK A.W. & MYERS D.E., 1981. Spatial dependence of physical properties of a typic torrifluent soil. Soil Science Society of America Journal, 45, pp. 709–715. (cité par Vauclin 1982)
- **GARDNER W.R.**, 1958 Some steady-state solutions of the unsaturated moisture flow equation with application to evaporation from a water table. *Soil Science*, 85, pp. 228-232.
- **VAN GENUCHTEN**, 1980. A closed form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Science Society of America Journal*, 44:. pp. 892-898.
- GIAMBELLUCA T.W., LOAGUE K., GREEN R.E. & NULLET M.A., 1996. Uncertainty in recharge estimation: impact on groundwater vulnerability assessments for the Pearl Harbor Basin, O'ahu, Hawai'i, U.S.A. *Journal of Contaminant Hydrology*, 23, pp. 85-112.
- GIGOT CL. & DESPREZ N., 1976. Carte géologique de la france à 1/50000 voves, xxi-17 Ministère de l'industrie et de la recherche, *Bureau des Recherches Géologiques et Minières*, Service Géologique National. Orléans. Carte + notice (Gigot C., Desprez N & Ferdière A.)
- **GIRARD M.-C.**, 1983. Recherche d'une modélisation en vue d'une représentation spatiale de la couverture pédologique Application a une région des plateaux jurassiques de Bourgogne. *Thèse de doctorat de l'Université de Paris VII*, Paris. 429 p.
- GIRARD M.C, WALTER C., BERTHELIN J., REMY J.C., MOREL J.-L. 2005. Sols et Environnement -Cours et Etudes de cas. *Dunod*, col. Sciences Sup., 832 p.
- **GOBAT J.-M., ARAGNO M. & MATTHEY W.**, 2003. Le sol vivant Bases de pédologie Biologie des sols. 2^e éd. Col. Gérer l'Environnement, *Presse Polytechniques et Universitaires de Lausanne*. 568 p.
- GOVERS G., VANDAELE K., DESMET P., POESEN J. & BUNTE K., 1994. The Role of Tillage in Soil Redistribution on Hillslopes. *European Journal of Soil Science*, 45, pp. 469-478.
- GUIMONT S., PERRIN-GANIER C., REAL B. & SCHIAVON M., 2005. Effects of soil moisture and treatment volume on bentazon mobility in soil. *Agronomy For Sustainable Development*, 25, pp. 323-329.
- GUMAA S.G., 1978. Spatial variability of in situ available water. PhD thesis of the University of Arizona, Tucson. 140 p. (*cité par Vauclin 1982*)
- **GUSTAFSON D.I. & HOLDEN L.R.**, 1990. Nonlinear pesticide dissipation in soil a new model based on spatial variability. *Environmental Science & Technology*, 24, pp. 1032-1038 (*cité par Beulke et Brown 2001*)
- HALL D.G., REEVE M.J., THOMASSON A.J., WRIGHT V.F., 1977. Water retention, porosity and density of field soils. Technical monograph. n^o9. *Soil Survey of England & Wales*, Harpenden. (*cité par Morvan et al., 2004*)
- HAVERKAMP R., ROSS P.J., SMETTEN K.R.J. & PARLANGE J.Y., 1994. Three dimensional analysis of infiltration from the disk infiltrometer 2. Physically based infiltration equation. Water Resources Research, 30:11, pp. 2931–2935.
- HAVERKAMP R., ARRUE J.L., VANDERVAERE J.-P., BRAUD I., BOULET G., LAURENT J.-P., TAHA A., Ross P.J. & ANGULO-JARAMILLO R., 1996. Hydrological and thermal behaviour of the vadose zone in the area of Barrax and Tomelloso (Spain): Experimental study, analysis and modeling Project UE n8 EV5C-CT 92 00 90. (*cité par Lassabatère et al. 2006*)
- HERMAN R.A. & SCHERER P.N., 2003. Comparison of linear and nonlinear regression for modeling the first-order degradation of pest-control substances in soil. *Journal of Agricultural And Food Chemistry*, 51, pp. 4722-4726.
- HERMAN R.A. & SCHERER P.N., 2006. Fit of four curve-linear models to decay profiles for pest control substances in soil. *Journal of Agricultural And Food Chemistry*, 54, pp. 4343-4349.
- HOLLANDER M. & WOLFE D.A., 1973. Nonparametric statistical inference. John Wiley & Sons, New York. pp. 115-120. (cité par R Development Core Team 2006, à propos du test de Kruskal-Wallis)
- IBANEZ F., GROSJEAN P. & ETIENNE M., 2006. pastecs: Package for Analysis of Space-Time Ecological Series. version 1.3-4, 2006-11-28. http://cran.r-project.org/src/contrib/Descriptions/pastecs.html dernier accès octobre 2007.

- IFEN, 2000. Les pesticides dans les eaux Bilan 1997–1998. Institut Français de l'Environnement, *Col. Études et Travaux*, 16 p.
- IFEN, 2002. Les pesticides dans les eaux Bilan annuel 2002. (données 1999–2000) Institut Français de l'Environnement, *Col. Études et Travaux*, n°36, 25 p.
- **IFEN**, 2003. Les pesticides dans les eaux Cinquième bilan annuel Données 2001. Institut Français de l'Environnement, *Col. Études et Travaux*, n°37, 29 p.
- **IFEN**, 2004. Les pesticides dans les eaux Sixièmes bilan annuel Données 2002. Institut Français de l'Environnement, *Col. Études et Travaux*, nº42, 34 p.
- IFEN 2006. Les pesticides dans les eaux –Données 2003–2004. Institut Français de l'Environnement, *Col. 'Les dossiers IFEN'*, n°5, 40 p.
- IGN, 2005. Série Bleue France Voves 2117E. 1/25 000. (édition précédente utilisée pour la topographie).
- INBERNON J., 1981. Variabilité spatiale des caractéristiques hydrodynamiques d'un sol du Sénégal. Appllication au calcul d'un bilan sous culture. Thèse de 3e cycle, Université Scientifique et Médicale de Grenoble, Institut National Polytechnique de Grenoble. (*cité par Vauclin 1982*)
- **INERIS**, 2007. Données technico-économiques sur les substances chimiques en France : Isoproturon. 27 p. http://rsde.ineris.fr/
- **ISI**, 2007. ISI glossary of statistical terms. *ISI International Statistical Institute*, Voorburg, The Netherlands. http://isi.cbs.nl/glossary/, dernier accès octobre 2007.
- **ISSA S. & WOOD M.**, 2005 Degradation of atrazine and isoproturon in surface and sub-surface soil materials undergoing different moisture and aeration conditions. *Pest Management Science*, 61, pp. 126-132.
- JAMAGNE M., 1967. Bases et techniques d'une cartographie des sols. *Annales Agronomiques*, 18 (*hors série*), 142 p.
- JENKINSON D.S, & COLEMAN K., 1994. calculating the annual input of organic mater to soil from measurement of total organic carbon and radiocarbon. *European Journal of Soil Science*, 45, pp. 167–174.
- JENNY H., 1941. Factors of Soil Formation A System of Quantitative Pedology. McGraw-Hill, New York. (*cité par McBratney et al., 2003 et Salvador-Blanes et al., 2007*)
- **JOURNAL OFFICIEL DE LA RÉPUBLIQUE FRANÇAISE**, 13 avril 2002. Arrêté du 7 mars 2002 portant inscription de la substance active isoproturon et modifiant l'arrêté du 14 avril 1998 établissant la liste des substances actives dont l'incorporation est autorisée dans les produits phytopharmaceutiques. *Ministère de l'Agriculture et de la Pêche*. JORF n°87, texte n°38, p. 6551.
- **JOURNAL OFFICIEL DE LA RÉPUBLIQUE FRANÇAISE**, 18 février 2004. avis aux distributeurs et utilisateurs de produits antiparasitaires visés par l'article L 253-1 du code rural . *Ministère de l'Agriculture, de l'Alimentation, de la Pêche et des Affaires Rurales*. JORF n°41, texte n° 140, p. 3333.
- JUNIOR, R.P.S., JARVIS N.J., BOESTEN J.J., VAN DER ZEE S.E. & ROULIER S., 2007. Testing MACRO (version 5.1) for pesticide leaching in a Dutch clay soil. *Pest Management Science*, 63, pp. 1011-1025.
- **JURADO-EXPOSITO M. & WALKER A.**, 1998. Degradation of isoproturon, propyzamide and alachlor in soil with constant and variable incubation conditions. *Weed Research*, 38, pp. 309-318.
- KAH M., BEULKE S. & BROWN C.D, 2007. Factors influencing degradation of pesticides in soil. *Journal of Agricultural And Food Chemistry*, 55, pp. 4487-4492.
- KAH M. & BROWN C.D., 2007. Changes in pesticide adsorption with time at high soil to solution ratios. *Chemosphere*, 68, pp. 1335-1343.
- KAY B.D. & ANGERS D.A., 2002. Soil structure. pp. 249–295, chap. 7, *In* WARRICK A.W. (éd.), 2002. *Soil physics companion.*, CRC Press, USA, 389 p.

- KLUTE A., 1965. Laboratory Measurement of Hydraulic Conductivity of Saturated Soil. pp. 210–221 In BLACK C.A., EVANS D.D., WHITE J.L., ENSMINGER L.E. & CLARK F.E., 1965. Methods of Soil Analysis. Agronomy, 9, part 1, 770 p.
- KÖHNE J.M., KÖHNE S., MOHANTY B.P. & ŠIMŮNEK J., 2004. Inverse Mobile-Immobile Modeling of Transport During Transient Flow: Effects of Between-Domain Transfer and Initial Water Content. *Vadose Zone Journal*, 3, pp. 1309-1321.
- KOREN V.I., FINNERTY B.D., SCHAAKE J.C., SMITH M.B., SEO D.J. & DUAN Q.Y., 1999. Scale dependencies of hydrologic models to spatial variability of precipitation. *Journal of Hydrology*, 217, pp. 285-302.
- KUTÍLEK M. & NIELSEN D.R., 1994. Soil hydrology. *Catena-Verlag*, GeoEcology textbook, Germany. ISBN : 9-923381-26-3., 370 p.
- **Киті́LEк M.**, 2004. Soil hydraulic properties as related to soil structure. *Soil and Tillage Research*, Soil Physical Quality, 79, pp. 175-184.
- **LAFRANCE P. & BANTON O.**, 1995. Implication of spatial variability of organic carbon on predicting pesticide mobility in soil. *Geoderma*, 65, pp. 331–338.
- LARSEN L. & AAMAND J., 2001. Degradation of herbicides in two sandy aquifers under different redox conditions. *Chemosphere*, 44, pp. 231-236.
- LASSABATÈRE L., ANGULO-JARAMILLO R., SORIA UGALDE J.M., CUENCA R., BRAUD I. & HAVERKAMP R., 2006. Beerkan Estimation of Soil Transfer Parameters through Infiltration Experiments BEST. *Soil Science Society of America Journal*, 70, pp. 521–532.
- LEIJ F.J. & VAN GENUCHTEN T.M., 2002. Solute transport. chap. 6, pp. 189–248, *In* WARRICK A.W. (éd.), 2002. *Soil physics companion.*, CRC Press, USA, 389 p.
- LENNARTZ B., 1999. Variation of herbicide transport parameters within a single field and its relation to water flux and soil properties. *Geoderma*, 91, pp. 327-345.
- LIN H.S., MCINNES K.J., WILDING L.P. & HALLMARK C.T., 1999(a). Effects of Soil Morphology on Hydraulic Properties: I. Quantification of Soil Morphology. *Soil Science Society of America Journal*, 63, pp. 948–954.
- LIN H.S., MCINNES K.J., WILDING L.P. & HALLMARK C.T., 1999(b). Effects of Soil Morphology on Hydraulic Properties: II. Hydraulic Pedotransfer Functions. *Soil Science Society of America Journal*, 63, pp. 955–961.
- LOGSDON S.D. & JAYNES D.B., 1996. Spatial variability of hydraulic conductivity in a cultivated field at different times. *Soil Science Society of America Journal*, 60, pp. 703–709.
- LORAIN J.-M., GIGOUT M. & DESPREZ N., 1973. Le Calcaire de Beauce Géologie, Hydrologie. Bulletin de liaison des laboratoires des Ponts et Chaussées, 78, Spécial U.
- LORAIN J.-M., 1973. La géologie du calcaire de Beauce. pp. 14-49, LORAIN J.-M., GIGOUT M. & DESPREZ N., 1973. Le Calcaire de Beauce Géologie, Hydrologie. *Bulletin de liaison des laboratoires des Ponts et Chaussées*, 78, Spécial U.
- LOVELAND P. & WEBB J., 2003. Is there a critical level of organic matter in the agricultural soils of temperate regions: a review. *Soil and Tillage Research* 70, pp. 1-18.
- LUXMOORE R.J. & SHAMA M.L., 1980. Runoff response to soil heterogeneity : experimental and simulation comparison for two contrasting watersheds. *Water Resources Research*, 16:4, pp. 675–684. (*cité par Vauclin 1982*)
- MACMILLAN B., 2007. Digital Soil Mapping and Soil Science. In Minasny B. ed., Pedometron 22, The newsletter of the pedometrics commission of the IUSS, p. 15.
- MADRIGAL I., BENOIT P., BARRIUSO E., ETIÉVANT V., SOUILLER C., RÉAL B. ET DUTERTRE A., 2002. Capacités de stockage et d'épuration des sols de dispositifs enherbés vis-à-vis des produits phytosanitaires Deuxième partie : Propriétés de rétention de deux herbicides, l'isoproturon et le diflufénicanil dans différents sols de bandes enherbées. *Étude et Gestion des Sols*, 9(4), pp. 287-302.
- MADRIGAL, I. 2004. Rétention de pesticides dans les sols de dispositifs tampon, enherbés et boisés rôles des matières organiques. *Thèse de l'Institut National Agronomique, Paris-Grignon*. (cité par Vincent et al. 2007)

- **MANICHON H.**, 1982. Influence des systèmes de culture sur le profil cultural: élaboration d'une méthode de diagnostic basée sur l'observation morphologique. Thèse de l'*Institut National Agronomique Paris-Grignon*, Paris.
- MCBRATNEY A.B., MINASNY B., CATTLE S.R. & VERVOORT R.W., 2002. From pedotransfer functions to soil inference systems. *Geoderma*, 109, pp. 41–73.
- MCBRATNEY A.B., MENDONCA SANTOS M.L. & MINASNY B., 2003. On digital soil mapping. *Geoderma*, 117, pp. 3-52.
- **MEIWIRTH K.**, 2003. Regional and local scale pesticide transport in the alluvial plain of the Swiss Rhône River Valley. *Thèse de l'école Polytechnique Fédérale de Lausanne*, no 2869.
- MEVIK B.H., 2006. VIP.R: Implementation of VIP (variable importance in projection) for the 'pls' package. Script en language R, version 1.1, ">http://mevik.net/work/software/VIP.R>
- **MEVIK B.H. & WEHRENS R.**, 2007. The pls package: Principal component and partial least squares regression in R. *Journal of Statistical Software*, 2007, 18:2, 24 p., ">http://www.jstatsoft.org/v18/i02>
- MILLOT G., 2004. Caractérisation du transport préférentiel des pesticides dans les sols de Beauce - Etude de la variabilité spatiale de la teneur en eau immobile à l'échelle d'une parcelle cultivée. Mémoire de Stage de l'école Polytechnique, UMR EGC (INA-PG/INRA), 24 p. + annexes.
- **MOEYS J.**, 2003. Description et désignation des sols agricoles de la Somme à la tarière. *Mémoire de Fin d'Études de Institut Supérieur d'Agriculture (ISA) de Lille*, Chambre d'Agriculture de la Somme, Amiens. 143 p. + annexes.
- **MOEYS J.**, 2004. Variabilité des sols et risques de contamination des aquifères : intérêts d'une prospection géophysique Résistivité et organisation spatiale des sols. *Rapport de DEA National de Science du Sol*. UMR, EGC (INA-PG/INRA), Thiverval-Grignon. 19 pp.
- MOEYS J., NICOULLAUD B., DORIGNY A. COQUET Y. & COUSIN I., 2006. Cartographie des sols à grande échelle : intégration explicite d'une mesure de résistivité apparente spatialisée à l'expertise pédologique. *Etude Et Gestion Des Sols* 13:4. pp. 269-286.
- MORVAN X., BRUAND A., COUSIN I., ROQUE J., BARAN N. & MOUVET C., 2004. Prédictions des propriétés de rétention en eau des sols d'un bassin versant à l'aide de fonctions de pédotransfert: Influence de la densité apparente et de la teneur en éléments grossiers. *Étude et Gestion des Sols*, 2004, 11, pp. 117-135.
- MULLA D.J. & MCBRATNEY A.B., 2002. Soil spatial variability. chap. 9, pp. 343–373, In WARRICK A.W. (éd.), 2002. *Soil physics companion*, CRC Press, USA, 389 p.
- NEMES A., 2002. Unsaturated soil hydraulic database of Hungary: HUNSODA. Agrokémia és Talajtan. 51, pp. 17–26. (cité par Nemes et al. 2005)
- **NEMES A., RAWLS W.J. & PACHEPSKY Y.A.**, 2005. Influence of Organic Matter on the Estimation of Saturated Hydraulic Conductivity. *Soil Science Society of America Journal*, 69, pp. 1330-1337.
- NEMETH-KONDA L., FULEKY G., MOROVJAN G. & CSOKAN P., 2002. Sorption behaviour of acetochlor, atrazine, carbendazim, diazinon, imidacloprid and isoproturon on Hungarian agricultural soil. *Chemosphere*, 48, pp. 545-552.
- NIELSEN D.R., BIGGAR J.W. & ERH K.T., 1973. Spatial variability of field-measured soil-water properties. *Hilgardia*, 42, pp. 215–260. (cité par Vauclin 1982)
- **NOBORIO K.**, 2001. Measurement of soil water content and electrical conductivity by time domain reflectometry: a review. *Computers and Electronics in Agriculture*, 31, pp. 213-237.
- **OFFICIAL JOURNAL OF THE EUROPEAN COMMUNITIES**, 19 /08 / 1991. Council Directive of 15 July 1991 concerning the placing of plant protection products on the market (91/414/EEC) Official Journal L230. (195 p.)
- **OFFICIAL JOURNAL OF THE EUROPEAN COMMUNITIES**, 26 /02 /2002. Commission Directive 2002/18/EC of 22 February 2002 amending Annex I to Council Directive 91/414/EEC concerning the placing of plant-protection products on the market to include isoproturon as an active substance 2002/18/EC. 4 p.

- OR D. & WRAITH J.M., 2002. Soil water content and water potential relationships. chap. 3, pp. 49–84, *In* WARRICK A.W. (éd.), 2002. *Soil physics companion.*, CRC Press, USA, 389 p.
- **PACHEPSKY Y., RAWLS W. & LIN H.**, 2006. Hydropedology and pedotransfer functions. *Geoderma*, 131, pp. 308-316. Hydropedology: Bridging disciplines, scales and data.
- **PANEL P.**, 2000. Protéger et restaurer la qualité des eaux souterraines vis-à-vis des produits phytosanitaires en beauce : le plan d'action de ouarville mise au point d'une méthode de quantification. Aventis CropScience France. *Mémoire de Fin d'Etudes de l'Institut National Agronomique Paris-Grignon.* 54 p. + annexes.
- PANTANI O.L., DOUSSET S., SCHIAVON M. & FUSI P., 1997. Adsorption of isoproturon on homoionic clays. *Chemosphere*, 35, pp. 2619-2626.
- PERRIN-GANIER C., BREUZIN C., PORTAL J. & SCHIAVON M., 1996. Availability and Persistence of Isoproturon under Field and Laboratory Conditions. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 35, pp. 226-230.
- **PESTICIDE ACTION NETWORK**, 2007. PAN Pesticide Database. <www.pesticideinfo.org>, dernier accès octobre 2007.
- PESTICIDES SAFETY DIRECTORATE, 2007. Phase out of products containing Isoproturon. Regulatory update: 06/2007. Issued: 15 March 2007 http://www.pesticides.gov.uk/ approvals.asp?id=2078>, dernier accès octobre 2007. voir aussi Advisory Committee on PESTICIDES, 2007. Minutes of the 323rd meeting of the Advisory Committee on Pesticides (ACP) held on 30th January 2007. < http://www.pesticides.gov.uk/ acp.asp?id=2079>, dernier accès octobre 2007.
- **PHILIP J.R.**, 1969. Theory of infiltration. *Advances in Hydrosciences*, 5, pp. 215-305. *Academic Press*, New York, USA.
- **PITRES, J.-C.**, 2006. Étude des relations entre les propriétés de surface des sols, leur état Hydrique et leur réflectance en Beauce chartraine. Apports pour l'interprétation d'images satellitaires. *Master recherche 'Environnements Continentaux et Hydro-sciences' (INAPG/Paris VI) mention 'Sols : Organisation, Fonctionnement et Gestion'*, 17 pp.
- RADCLIFFE, D.E. & RASMUSSEN T.C., 2002. Soil water mouvement. chap. 4, pp. 85–126. In WARRICK A.W. (éd.), 2002. Soil physics companion, CRC Press, USA, 389 p.
- RAO P.S.C., HORNSBY A.G. & JESSUP R.E., 1985. Indice for Ranking the Potential for Pesticide Contamination of Groundwater. Symposium, *Florida Agricultural Experiment Station Journal*, Series n%525, vol 44, pp. 1-8.
- **RAWLS W.J., GIMÉNEZ D., & GROSSMAN R.**, 1998. Use of soil texture, bulk density and the slope of the water retention curve to predict saturated hydraulic conductivity. *Transaction of the ASAE*, 4, pp. 983–988.
- **R DEVELOPMENT CORE TEAM**, 2006. R: A language and environment for statistical computing. *R Foundation for Statistical Computing*, Vienna, Austria. ISBN 3-900051-07-0, http://www.R-project.org.
- **REGALADO C.A.**, 2005. On the distribution of scaling hydraulic parameters in a spatially anisotropic banana field. *Journal of Hydrology*, 307, pp. 112-125.
- **REFSGAARD J.C. & HENRIKSEN H.J.**, 2004. Modelling guidelines terminology and guiding principles. *Advances in Water Resources*, 27, pp. 71-82.
- **REYNOLDS W.D. & ELRICK**, D.E., 1990. Ponded infiltration from a single ring. Part 1. Analysis of steady flow. *Soil Science Society of America Journal*, 54, pp. 1233–1241.
- RICHARDS L.A., 193 1. Capillary conduction of liquids in porous mediums. *Physics*, 1, pp. 318–333. (*cité par Kutílek et Nielsen, 1994*)
- **RIGAUD A.C.**, 1998. Apport de la modélisation en tant qu'outil d'évaluation du risque de contamination des eaux souterraines par les produits de protection des plantes. *Mémoire de Fin d'étude de l'Institut National Agronomique Paris-Grignon*, DAA AGER, Rhône-Poulenc Agro France, 53 p. + annexes.
- RIGAUD J.-P. & LEBRETON J.-C., 2004. Points de repère Blé : désherbage de post-levée. Chambre d'Agriculture de Mayenne. http://www.mayenne.chambagri.fr/ services/ documentation/ ble_desherbage_post_levee.pdf>, denier accès octobre 2007.

- **ROBERTS T.R.** (Éd.), 1998. Metabolic pathways of agrochemicals Part 1 Herbicides & plant growth regulators. *The Royal Society of Chemistry*, Cambridge.
- **RODRIGUEZ-CRUZ S.M., JONES J.E. & BENDING G.D.**, 2006. Field-scale study of the variability in pesticide biodegradation with soil depth and its relationship with soil characteristics. *Soil Biology and Biochemistry*, 38, pp. 2910-2918.
- ROGER-ESTRADE J., RICHARD G., CANEILL J., BOIZARD H., COQUET, Y., DEFOSSEZ P. & MANICHON H., 2004. Morphological characterisation of soil structure in tilled fields: from a diagnosis method to the modelling of structural changes over time. *Soil and Tillage Research* 79, pp. 33-49.
- **ROULIER S.**, 1999. Caractérisation hydrodispersive in situ de sols non saturés par infiltration d'eau et de soluté. Cas de sols structurés et de sols hétérogènes. *Thèse de l'Université Joseph Fourrier Grenoble I*, spécialité mécanique des milieux géophysiques et Environnement. 267 p.
- **ROYSTON P.**, 1982. An Extension of Shapiro and Wilk's W Test for Normality to Large Samples. *Applied Statistics*, 31, pp. 115-124. (cité par R Development Core Team, 2006)
- Russo D. & BRESLER E., 1981. Soil hydraulic properties as stochastic processes : I. An analysis of field spatial variability. *Soil Science Society of America Journal*, 45, pp. 682–687.
- RUSSO D. & BOUTON M., 1992. Statistical analysis of spatial variability in unsaturated flow parameters. *Water Ressources Research*, 28:7, pp. 1911–1925.
- SALVADOR-BLANES S., MINASNY B. & MCBRATNEY A.B., 2007. Modelling long-term in situ soil profile evolution: application to the genesis of soil profiles containing stone layers. *European Journal of Soil Science*, 58, pp. 1535–1548.
- SANCO, 2002. Review report for the active substance isoproturon. European Commission, Health & Consumer Protection Directorate General, Directorate E – Food Safety: plant health, animal health and welfare, international questions, E1 Plant health. 3045/99-final. 32 pp.
- SAUER T.J. & LOGSDON S.D., 2002. Hydraulic and Physical Properties of Stony Soils in a Small Watershed. *Soil Science Society of America Journal*, 66, pp. 1947-1956.
- SCHWARZEL K. & PUNZEL J., 2007. Hood Infiltrometer A New Type of Tension Infiltrometer Soil. Soil Science Society of America Journal, 71, pp. 1438-1447.
- SCOTTER D.R., CLOTHIER B.E., HARPER E.R., 1982. Measuring saturated hydraulic conductivity and sorptivity using twin rings. *Australian Journal of Soil Research*, 20, 295–304.
- SHEIKH V. & VAN LOON E.E., 2007. Comparing Performance and Parameterization of a One-Dimensional Unsaturated Zone Model across Scales. *Vadose Zone Journal*, 6, pp. 638-650.
- SHLENS J., 2005. A Tutorial on Principal Component Analysis. 10/12/2005, version 2, Systems Neurobiology Laboratory, Salk Institute for Biological Studies & Institute for Nonlinear Science, University of California, San Diego, La Jolla, CA; http://www.snl.salk.edu/~shlens/pub/ notes/ pca.pdf> dernier accès octobre 2007.
- ŠIMŮNEK J., ANGULO-JARAMILLO R., SCHAAP M.G., VANDERVAERE J.-P. & VAN GENUCHTEN M.T., 1998. Using an inverse method to estimate the hydraulic properties of crusted soils from tension-disc infiltrometer data. *Geoderma*, 86, pp. 61–81.
- ŠIMŮNEK J., JARVIS N.J., VAN GENUCHTEN M.T. & GARDENAS A., 2003. Review and comparison of models for describing non-equilibrium and preferential flow and transport in the vadose zone. *Journal of Hydrology*, 272, pp. 14–35.
- **SMETTEN K.R.J. & CLOTHIER B.E.**, 1989. Measuring unsaturate sorptivity and hydraulic conductivity using multiple disk permeameters. *Journal of Soil Science*, 40, pp. 563-568.
- SMETTEM K.R.J., PARLANGE J.-Y., ROSS P.J., AND HAVERKAMP R., 1994. Three-dimensional analysis of infiltration from the disc infiltro- meter: 1. A capillary-based theory. *Water Resources Research.* 30, pp. 2925-2929.
- SMETTEM K.R.J., ROSS P.J., HAVERKAMP R., AND PARLANGE J.-Y., 1995. Three-dimensional analysis of infiltration from the disc infiltro- meter: 3. Parameter estimation using a double-disc tension infiltro- meter. *Water Resources Research*, 31, pp. 2491-2495.

- **SNOW V.**, 1999. In situ measurement of solute transport coefficients: Assumptions and errors. *Soil Science Society of America Journal*, 63, pp. 255–263.
- SØRENSEN S.R., BENDING G.D., JACOBSEN C.S., WALKER A. & AAMAND J., 2003. Microbial degradation of isoproturon and related phenylurea herbicides in and below agricultural fields. *FEMS Microbiology Ecology*, 45, pp. 1–11.
- SPARK K.M. & SWIFT R.S., 2002. Effect of soil composition and dissolved organic matter on pesticide sorption. *The Science of The Total Environment*, 298, pp. 147-161.
- SPLIID N.H. & KOPPEN B., 1998. Occurrence of pesticides in danish shallow ground water. *Chemosphere*, 37, pp. 1307-1316.
- STOLTE J., 1997. Determination of the saturated hydraulic conductivity using the constant head method. pp. 27–32, In STOLTE J. (éd.), 1997. Manual for Soil Physical Measurement – version 3. Technical Document 37, sc-dlo, Wageningen, The Nederlands. 77 pp.
- STOWA-RIZA, 1999. Smooth Modelling in Water Management, Good Modelling Practice Handbook. STOWA report 99-05, *Dutch Dept. of Public Works, Institute for Inland Water Management and Waste Water Treatment.* report 99.036, ISBN 90-5773-056-1, 165 p.
- **TALSMA T. & PARLANGE J.Y.**, 1972. One dimensional vertical infiltration. *Australian Journal of Soil Research*, 10, pp. 143–150. (cité par Roulier 1999)
- TAMARI S., BRUCKERT L., HALBERTSMA J. & CHABOEUF J., 1993. A Simple Method for determining soil hydraulic properties in the laboratory. *Soil Science Society of America Journal*, 57:3, pp. 642–651.
- **THOMAS E.V.**, 2003. Non-parametric statistical methods for multivariate calibration model selection and comparison. *Journal of Chemometrics*, 17, pp. 653-659.
- **TOMLIN C.** (éd.), 1994. A world compendium The pesticide manual Incorporating the Agrochemical Handbook. 10^e éd., *British Crop Protection Council, Royal Society of Chemistry, Information Sciences*, Farnham, Royaume-Uni. 1376 p.
- TRANTER G., MINASNY B., MCBRATNEY A.B., MURPHY B., MCKENZIE N.J., GRUNDY M. & BROUGH D., 2007. Building and testing conceptual and empirical models for predicting soil bulk density. *Soil Use and Management*, 23(4), pp. 437-443.
- VANDERVAERE J.P., 1995. Caractérisation hydrodynamique du sol in situ par infiltrométrie à disques. Analyse critique des régimes pseudopermanents, méthodes transitoires et cas des sols encroûtés. *Thèse de Doctorat de l'Université Joseph Fourier, Grenoble 1*, INPG, 329 p.
- VANDERVAERE J., VAUCLIN M. & ELRICK D.E., 2000(a). Transient flow from tension infiltrometers: I. The two-parameter equation. *Soil Science Society of America Journal*, 64, pp. 1263-1272.
- VANDERVAERE J., VAUCLIN M. & ELRICK D. E., 2000(b). Transient Flow from Tension Infiltrometers: II. Four Methods to Determine Sorptivity and Conductivity. *Soil Science Society of America Journal*, 64, pp. 1272–1284.
- VAUCLIN M., 1982. Méthodes d'étude de la variabilité spatiale des propriétés d'un sol. pp. 9–43, In INRA (éd.) 1983, Variabilité spatiale des processus de transfert dans les sols. Les colloques de l'INRA, n°15, Avignon, 24–25 juin 1982.
- VEREECKEN H., MAES J., FEYEN J., DARIUS P., 1989. Estimating the soil moisture retention characteristics from texture, bulk density and carbon content. *Soil Science*, 148:6, pp. 389-403.
- VINCENT A., BENOIT P., POT V., MADRIGAL I., DELGADO-MORENO L. & LABAT C., 2007. Impact of different land uses on the migration of two herbicides in a silt loam soil: unsaturated soil column displacement studies. *European Journal of Soil Science*, 58, pp. 320-328.
- DE VOS B., VAN MEIRVENNE M., QUATAERT P., DECKERS J. & MUYS B., 2005. Predictive Quality of Pedotransfer Functions for Estimating Bulk Density of Forest Soils. *Soil Science Society of America Journal*, 69, pp. 500-510.
- WALKER A. & JURADO-EXPOSITO M., 1998. Adsorption of isoproturon, diuron and metsulfuronmethyl in two soils at high soil : solution ratios. *Weed Research*, 38, pp. 229–238.
- WALKER A., TURNER I., CULLINGTON J. & WELCH S., 1999. Aspects of the adsorption and degradation of isoproturon in a heavy clay soil. *Soil Use And Management*, 15, pp. 9-13.

- WALKER A., JURADO-EXPOSITO M., BENDING G.D. & SMITH V.J.R., 2001. Spatial variability in the degradation rate of isoproturon in soil. *Environmental Pollution*, 111, pp. 407-415.
- WALKER A., BROMILOW R.H., NICHOLLS P.H., EVANS A.A. & SMITH V.J.R., 2002. Spatial variability in the degradation rates of isoproturon and chlorotoluron in a clay soil. *Weed Research*, 42, pp. 39-44.
- WALKER A. & AUSTIN C.R., 2004. Effect of recent cropping history and herbicide use on the degradation rates of isoproturon in soils. *Weed Research*, 44:1, pp. 5-11.
- WARKENTIN B.P., 1992. Soil Science For Environmental-Quality How Do We Know What We Know? *Journal Of Environmental Quality*, 21:2, pp. 163-166.
- WARRICK A.W. & NIELSEN D.R., 1980. Spatial variability of soil physical properties in the field. chap. 13, pp. 319-376 *In* HILLEL D. (ed.) 1980. *Applications of soil physics, Academic Press*.
- WARRICK A.W. & BROADBRIDGE P., 1992. Sorptivity and macroscopic capillary length relationships. *Water Resources Research*, 28, pp. 427–431.
- WAUCHOPE R., YEH S., LINDERS J., KLOSKOWSKI R., TANAKA K., RUBIN B., KATAYAMA A., KORDEL, W., GERSTL Z., LANE M. & UNSWORTH J., 2002. Pesticide soil sorption parameters: theory, measurement, uses, limitations and reliability. *Pest Management Science*, 58, pp. 419-445.
- WEBSTER R., 1977. Spectral analysis of gilgai soil. Australian Journal of Soil Research, 15:3, pp. 191-204. (cité par Vauclin, 1982)
- WEBSTER R. & OLIVER M.A., 1992. Sample adequately to estimate variograms of soil properties. *Journal of Soil Science*, 43, pp. 177–192.
- WEBSTER R., 2001. Statistics to support soil research and their presentation. *European Journal of Soil Science*, 52, pp. 331-340.
- WEBSTER R., 2007. Analysis of variance, inference, multiple comparisons and sampling effects in soil research. *European Journal of Soil Science*, 58, pp. 74–82.
- WHITE I. & SULLY M.J., 1987. Macroscopic and microscopic capillary length and time scale from field infiltration. *Water Resources Research*, 23, pp. 1514–1522.
- WILLIAMS J., ROSS P.J. & BRISTOW K.L. 1992. Prediction of the Campbell water retention function from texture, structure and organic matter. *In Proceedings of an International Workshop on Indirect Methods for Estimating the Hydraulic Properties of Unsaturated Soils* (éds van Genuchten M.T.h., Leij (cité par Cresswell et al. 2006)
- WIND G.P., 1968. Capillary conductivity data estimated by a simple method. pp. 181–191, In RIJTEMA P.E. & WASSINK H. (éd.), Water in the unsaturated zone. Vol. 1. Proceedings of the Wageningen symposium, Wageningen, the Netherlands. 19–23 June 1966. IASH, Gentbrugge, the Netherlands and UNESCO, Paris.
- WOLD S., SJOSTROM M. & ERIKSSON L., 2001(a). PLS-regression: a basic tool of chemometrics. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 58, pp. 109-130.
- WOLD S., TRYGG J., BERGLUND A. & ANTTI H., 2001(b). Some recent developments in PLS modeling. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 58, pp. 131-150.
- **WOODING R.A.**, 1968. Steady infiltration from a shallow circular pond. *Water Resourses Research*, 4, pp. 1259-1273.
- WORRALL F., PARKER A., RAE J.E. & JOHNSON A.C., 1996. Equilibrium adsorption of isoproturon on soil and pure clays. *European Journal of Soil Science*, 47, pp. 265-272. (*cité par Clausen et al.*, 2001).
- WÖSTEN, J.H.M., LILLY A., NEMES A., & LE BAS C., 1999. Development and use of a database of hydraulic properties of European soils. *Geoderma*, 90, pp. 169–185. (*cité par Nemes et al. 2005*)
- WRAITH J.M., ROBINSON D.A., JONES S.B. & LONG D.S., 2005. Spatially characterizing apparent electrical conductivity and water content of surface soils with time domain reflectometry. *Computers and Electronics in Agriculture*, Applications of Apparent Soil Electrical Conductivity in Precision Agriculture, 2005, 46, pp. 239-261.

- ZIMMERMAN D.W., 2000. Statistical significance levels of nonparametric tests baised by heterogeneous variances of treatment groups. *Journal of General psychology*, 127, pp. 354-364.
- DE ZORZI P., BARBIZZI S., BELLI M., CICERI G., FAJGELJ A., MOORE D., SANSONE U. & VAN DER PERK M., 2005. Terminology in soil sampling (iupac recommendations 2005). *Pure and Applied Chemistry*, 77:5, p. 827–841.

♦ Liste des figures

figure 1	- Articulation entre le travail de thèse et le programme ESHEL 19
Partie I	Étude bibliographique24
figure 2	 Volumes et masses des constituants solides, liquides et gazeux du sol.
figure 3	- Fractions granulométriques fines et grossières du sol
figure 4	 Triangle des textures de la Chambre d'Agriculture de l'Aisne et ses 15 classes de textures
figure 5	 Les processus de transport, d'adsorption et de dégradation des pesticides dans les différentes phases du sol
figure 6	– Allure de la fonction de Campbell (1974) de θ en fonction de h 44
figure 7	- Allure de la fonction de Campbell (1974) de K en fonction de h 48
figure 8	– Schéma du modèle eau mobile – eau immobile
figure 9	 Allure d'une isotherme de Freundlich pour différentes valeurs de N_F et schéma explicatif de l'adsorption58
figure 10	 Exemple d'allure de cinétiques de dégradation exponentielle et bi- exponentielle
figure 11	- Formule plane de l'isoproturon et de ses métabolites
Partie II Le secteur agricole de Ouarville71	
figure 12	- Localisation du secteur étudié à l'échelle de la France
figure 13	- Carte topographique du secteur étudié
figure 14	– Paysages agricoles autour de Ouarville
figure 15	 Graphique 'box & whisker' de la température moyenne mensuelle, et du nombre de jours de gel entre 1971 et 2005.
figure 16	- Graphique 'box & whisker' des précipitations et de l'évapotranspiration

Partie III Matériels & méthodes86

figure 20	- Photo illustrant le protocole de prélèvement (Site 20 037)	

figure 21	 Localisation des sites de prélèvements dans le secteur de Ouarville. 93
figure 22	 Distances du site le plus proche, distance moyenne aux autres sites et histogramme des distances entre les 34 sites échantillonnés94
figure 23	 Répartition des sites étudiés par rapport au type de sol indiqué par la carte de sol du secteur95
figure 24	 Répartition des sites étudiés par rapport à la formation géologique indiquée par la carte géologique du secteur.
figure 25	 Schéma de l'infiltromètre à disque et des composantes de l'infiltration.101
figure 26	 Méthode de détermination graphique de la sorptivité (White et Sully, 1987)
figure 27	 Méthode de détermination graphique du flux en régime permanent q_{RP} (White et Sully, 1987).
figure 28	– Méthode de détermination de la sorptivité sur un graphique d.l/d. $\sqrt{t} = f(\sqrt{t})$, avec la méthode de Haverkamp <i>et al.</i> (1994) 111
figure 29	- Méthode de détermination de la sorptivité sur un graphique d.l/d. $\sqrt{t} = f(\sqrt{t})$, pour la méthode White et Sully modifiée
figure 30	Mesures de l'adsorption d'une molècule par agitation d'un tube contenant un mélange eau-sol liquide (mesure en batch)
figure 31	 Incubation de sol avec une solution de "C isoproturon pour mesurer la cinétique de dégradation et de minéralisation
figure 32	- Extractions successives de l'isoproturon des incubations avec une solution de CaCl ₂ et 3 ajouts de méthanol
figure 33	Concentration sur cartouches de la solution aqueuse contenant l'isoproturon extrait des incubations
figure 34	- Concentration par evaporation du méthanol contenant l'isoproturon extrait des incubations
figure 35	- Position des différentes statistiques sur un graphique 'box & whisker'.136
figure 36	 Illustration des composantes (axes de plus grande variance) déterminées par analyse en composantes principales sur 3 propriétés corrélées X, Y et Z
Partie I	V Résultats148
figure 37	 Textures non décarbonatées des sols du secteur agricole de Ouarville, placées sur le triangle des textures de la Chambre d'Agriculture de l'Aisne. Vue générale et agrandissement
figure 38	 Histogramme de la teneur en argile (non-décarbonatée)
figure 39	 Graphique 'box & whisker' des charges massiques des différentes fractions granulométriques grossières (graviers, cailloux et totale). 151
figure 40	 Graphique 'box & whisker' de la teneur en carbone organique 152
figure 41	- Graphique 'box & whisker' de la teneur en azote organique 152
figure 42	- Graphique 'box & whisker' du rapport carbone organique sur azote.153
figure 43	– Graphique 'box & whisker' de la teneur en CaCO ₃
figure 44	- Graphique box & whisker du pH des échantillons analysés 154

figure 46	 Symboles utilisés dans les schémas pour les principaux matériaux parentaux du secteur étudié.
figure 47	 Schéma des successions de matériaux parentaux observées (ou non) sur le secteur étudié
figure 48	 Matériaux 'intermédiaires' résultants de mélanges sous l'effet de la cryoturbation
figure 49	 Statistiques descriptives des teneurs en éléments grossiers maximales dans les sondages décrits à la tarière
figure 50	 Statistiques de distribution des teneurs en éléments grossiers maximales dans les sondages décrits à la tarière
figure 51	 Graphique 'box & whisker' des teneurs en éléments grossiers maximales des sondages tarière.
figure 52	 Graphiques box & whisker des teneurs en eau [cm³.cm⁻³] mesurées à différents potentiels matriciels caractéristiques (saturation, pF 2 et pF 4,2) & de la réserve utile estimée.
figure 53	– Graphique 'box & whisker' du paramètre h_{A} de Campbell
figure 54	- Graphique 'box & whisker' du paramètre b de Campbell165
figure 55	– Exemple graphique (1) de détermination de la sorptivité pour la méthode White et Sully (modifiée), en d.l/d. $\sqrt{t} = f(\sqrt{t_{géom}})$
figure 56	– Exemple de résultat (1) de la détermination de q_{RP} par la méthode de White et Sully (1987) et de l'ajustement de la courbe d'infiltration $I = S.\sqrt{t}$ avec la valeur de S déterminée précédemment
figure 57	– Exemple graphique (2) de détermination de la sorptivité pour la méthode White et Sully (modifiée), en d.l/d. $\sqrt{t} = f(\sqrt{t_{géom}})$
figure 58	– Exemple de résultat (2) de la détermination de q _{RP} par la méthode de White et Sully et de l'ajustement de la courbe d'infiltration I = S. \sqrt{t} avec la valeur de S déterminée précédemment
figure 59	– Exemple de résultat (1) de la détermination de S et K par la méthode de Haverkamp <i>et al.</i> (1994), avec une détermination graphique en d.l/d. $\sqrt{t} = f(\sqrt{t_{géom}})$
figure 60	– Exemple de résultat (2) de la détermination de S et K par la méthode de Haverkamp <i>et al.</i> (1994), avec une détermination graphique en d.l/d. $\sqrt{t} = f(\sqrt{t_{géom}})$
figure 61	 Exemple de résultat (1) de l'ajustement des équations de Haverkamp et al. (1994) du régime transitoire et du régime permanent, sur l=f(t), après détermination graphique de S et K sur le régime transitoire171
figure 62	 Exemple de résultat (2) de l'ajustement des équations de Haverkamp du régime transitoire et du régime permanent, sur l=f(t), après détermination graphique de S et K sur le régime transitoire
figure 63	 Exemple de résultat (1) de l'ajustement des équations de Haverkamp et al. (1994) du régime transitoire et du régime permanent, sur l=f(t), après détermination directe de S et K sur les régimes transitoire et permanent
figure 64	 Exemple de résultat (2) de l'ajustement des équations de Haverkamp et al. (1994) du régime transitoire et du régime permanent, sur l=f(t), après détermination directe de S et K sur les régimes transitoire et permanent

figure 65	 Isovaleurs de la RRSEP%_{RT} (régime transitoire) en fonction des valeurs de S et de K.
figure 66	 Isovaleurs de la RRSEP%_{RT,RP} (moyenne du régime transitoire et du régime permanent) en fonction des valeurs de S et de K. Les isolignes représentées sont 10, 25, 50, 100, 250, 500, 1000 %
figure 67	 Isovaleurs de la RRSEP% globale (moyenne du régime transitoire, du régime permanent et de l'écart à un temps de stabilisation) en fonction des valeurs de S et de K. Les isolignes représentées sont 10, 25, 50, 100, 250, 500, 1000 %
figure 68	 Graphique 'box & whisker' des sorptivités, en fonction des différentes méthodes de calcul (intervalle [i-1,i+1]).
figure 69	 Graphique 'box & whisker' des conductivités hydrauliques, en fonction des différentes méthodes de calcul (intervalle [i-1,i+1]).
figure 70	 Graphique 'box & whisker' des écarts au temps de stabilisation, en fonction des différentes méthodes de calcul (intervalle [i-1,i+1]) 182
figure 71	– Graphique 'box & whisker' de la conductivité hydraulique K _S 183
figure 72	 Flux d'infiltration en fonction de l'infiltration cumulée pour les mesures d'infiltrométrie destinées à mesurer la teneur en eau immobile 184
figure 73	- Graphique box & whisker de la fraction d'eau immobile
figure 74	- Histogramme de la fraction d'eau immobile
figure 75	- Exemple graphique du calcul de la DT50 de l'isoproturon par régression linéaire, avec C_0 imposée. Lit de semence du site 20 003.192
figure 76	- Exemple graphique du calcul de la DT50 de l'isoproturon par régression linéaire, avec C_0 imposée. Lit de semence du site 20 006.193
figure 77	 Exemple graphique du calcul de la DT50 de l'isoproturon par régression linéaire, avec C₀ calculée. Lit de semence du site 20 003.193
figure 78	– Exemples graphiques du calcul de la DT_{50} de l'isoproturon par régression linéaire, avec C_0 calculée. Lit de semence du site 20 006.194
figure 79	 Exemple graphique du calcul de la DT₅₀ de l'isoproturon par ajustement direct. Site 20 003–P1196
figure 80	 Exemple graphique du calcul de la DT50 de l'isoproturon par ajustement direct. Site 20 006–P1196
figure 81	– Erreur d'ajustement (RRSEP% ou MAEP%) en fonction de la DT_{50} . 198
figure 82	 Graphique 'box & whisker' des demi-vies (DT₅₀) de dégradation de l'isoproturon estimées selon les 7 méthodes de détermination testées.199
figure 83	– Histogramme de la DT_{50} estimée par minimisation de la MAEP% 200
figure 84	 Visualisation graphique des liens éventuels entre texture et la teneur en CaCO₃, ainsi qu'entre texture et teneur en graviers
figure 85	 Visualisation graphique des liens éventuels entre texture et carbone organique, ainsi qu'entre texture et K_{oc}
figure 86	 résultats de l'ACP sur les propriétés physico-chimiques et de rétention en eau des échantillons
figure 87	 Résultats de l'ACP sur les propriétés physico-chimiques, de rétention eau des échantillons et la fraction d'eau immobile
figure 88	 résultats de l'ACP sur les propriétés physico-chimiques, de rétention eau des échantillons et de conductivité hydraulique à saturation et à h = -1 cm

figure 89	 résultats de l'ACP sur les propriétés physico-chimiques, de rétention eau des échantillons et d'adsorption linéaire de l'isoproturon
figure 90	 résultats de l'ACP sur les propriétés physico-chimiques, de rétention eau des échantillons et d'adsorption normalisée de l'isoproturon 228
figure 91	 résultats de l'ACP sur les propriétés physico-chimiques, de rétention eau des échantillons, de dégradation et de minéralisation de l'isoproturon
figure 92	 Coefficients de la régression multiple (PLSR) de prédiction du K_D, et graphique valeurs prédites – valeurs réelles de la régression
figure 93	 Coefficients de la régression multiple (PLSR) de prédiction du K_{OC}, et graphique valeurs prédites – valeurs réelles de la régression

Partie V Discussion & conclusions239

figure 94

figure 95	 Modalité de prélèvement des cylindres de sol non perturbés pour les masses volumiques apparentes.
figure 96	 Les différents types de variables utilisées par les modèles informatiques de transferts de pesticides
figure 97	- Fiche de sondage tarière utilisée pour décrire les sondages
figure 98	 Carte de la profondeur du sol et de la teneur en argile de l'horizon de surface sur 34 sites (50 couches) étudiés
figure 99	 Carte des valeurs de teneur en éléments grossiers et en CaCO₃ de l'horizon de surface sur 34 sites (50 couches) étudiés
figure 100	 Carte des valeurs de réserve utile et des conductivités hydrauliques à saturation de l'horizon de surface sur 34 sites (50 couches) étudiés.305
figure 101	 Carte des valeurs de fraction d'eau immobile de l'horizon de surface sur 34 sites (50 couches) étudiés
figure 102	 Carte des valeurs teneurs en carbone organique et de coefficient d'adsorption de l'horizon de surface sur 34 sites (50 couches) étudiés.306
figure 103	 Carte des valeurs de coefficient d'adsorption normalisé par la fraction de carbone organique et de temps de demi-vie de l'isoproturon de l'horizon de surface sur 34 sites (50 couches) étudiés

Liste des tableaux

Partie I	Étude bibliographique	24
tableau 1	- Nomenclature de l'isoproturon et de ses métabolites	64

tableau 2 tableau 3 tableau 4 tableau 5 tableau 6 tableau 7	 Principales propriétés physico-chimiques de l'isoproturon
Partie I	I Le secteur agricole de Ouarville71
tableau 8	- Occupation des sols dans le secteur étudié
tableau 9	 Récapitulatifs des formations géologiques présentes sur le secteur de Ouarville, d'après la carte géologique de Voves
tableau 10	 Surface occupée par les différentes formations géologiques
tableau 11	 Règles de conversion utilisées pour passer des types de sol de la classification CPCS à ceux du Référentiel pédologique 199582
tableau 12	 Surface occupée par les différents types de sol sur la carte
tableau 13	 Horizons caractéristiques des types pédologiques représentés par la carte des sols du secteur
Partie I	II Matériels & méthodes86
tableau 14	 Méthodes et normes utilisées pour les analyses physico-chimiques des échantillons par le Laboratoire d'Analyse des Sols de Arras96
tableau 15	 Interprétation des valeurs de Skewness et Kurtosis.
tableau 16	 Décomposition des propriétés en plusieurs propriétés 'simplifiées' utilisées pour l'approche GIFI-PLSR146
Partie I	V Résultats148
tableau 17	 Statistiques descriptives des fractions granulométriques non décarbonatées149
tableau 18	Statistiques descriptives des fractions granulométriques décarbonatées
tableau 19	 Statistiques de distribution des fractions granulométriques non décarbonatées
tableau 20	- Statistiques descriptives du carbone, de l'azote organique, et du C/N.152
tableau 21	- Statistiques de distribution du carbone, de l'azote organique, et du C/N
tableau 22	 Statistiques descriptives de la teneur en CaCO₃ (en g de CaCO₃. g de sol sec total⁻¹).
tableau 23	- Statistiques descriptives du pH des échantillons analysés [-] 153

tableau 24	 Statistiques descriptives des masses volumiques apparentes mesurées (g.cm⁻³).
tableau 25	 Statistiques descriptives de la profondeur d'apparition du substrat (cm)
tableau 26	- Graphique 'box & whisker' de la profondeur d'apparition du substrat.157
tableau 27	- Contingence des échantillons en fonction du type de sol
tableau 28	 Contingence des échantillons en fonction de la modalité de travail du sol (conventionnel – simplifié)159
tableau 29	 Statistiques descriptives des teneurs en eau volumiques mesurées à différents potentiels matriciels caractéristiques (saturation, pF2 et pF4,2) et de la réserve utile estimée. [g.cm⁻³]163
tableau 30	 Statistiques de distribution des teneurs en eau mesurées à différents potentiels matriciels caractéristiques (pF 0, 2 et 4,2) et de la réserve utile estimée.
tableau 31	 Statistiques descriptives des paramètres de la fonction de rétention en eau de Campbell.
tableau 32	 Statistiques de distribution des paramètres de la fonction de rétention en eau de Campbell.
tableau 33	 Paramètres statistiques de S et K calculés avec la méthode de White et Sully (1987), pour le secteur agricole
tableau 34	 Paramètres statistiques de S et K calculés avec la méthode de White et Sully (1987), pour la parcelle (Millot, 2004)166
tableau 35	 Paramètres statistiques de S et K calculés avec la méthode de Haverkamp <i>et al.</i> (1994), avec un ajustement graphique par régression linéaire, pour le secteur agricole
tableau 36	 Paramètres statistiques de S et K calculés avec la méthode de Haverkamp <i>et al.</i> (1994), avec un ajustement graphique par régression linéaire, pour la parcelle d'étude
tableau 37	 Paramètres statistiques de S et K calculés avec la méthode de Haverkamp <i>et al.</i> (1994), avec un ajustement direct et une fonction d'erreur basée sur les régimes transitoire et permanent, ainsi que l'écart au temps de stabilisation, (secteur agricole ; fonction d'erreur %RRSEP_{globale})
tableau 38	 Paramètres statistiques de S et K calculés avec la méthode de Haverkamp <i>et al.</i> (1994), avec un ajustement direct et une fonction d'erreur basée sur les régimes transitoire et permanent, ainsi que l'écart au temps de stabilisation, (parcelle d'étude ; fonction d'erreur %RRSEP_{globale})
tableau 39	 Paramètres statistiques de S et K calculés avec la méthode de Haverkamp <i>et al.</i> (1994), avec un ajustement direct et une fonction d'erreur basée sur les régimes transitoire et permanent (fonction d'erreur %RRSEP_{globale})
tableau 40	 Paramètres statistiques de S et K calculés avec la méthode de Haverkamp <i>et al.</i> (1994), avec un ajustement direct et une fonction d'erreur basée sur les régimes transitoire et permanent (secteur agricole ; fonction d'erreur %RRSEP_{globale,alt})
tableau 41	- Paramètres statistiques de S et K calculés avec la méthode de Haverkamp <i>et al.</i> (1994), avec un ajustement direct et une fonction

	d'erreur basée sur les régimes transitoire et permanent (fonction d'erreur %RRSEP _{globale})
tableau 42	 Statistiques descriptives et de distribution de la conductivité hydraulique à saturation K_s.
tableau 43	- Statistiques descriptives de la teneur en eau immobile
tableau 44	 Statistiques descriptives et de distribution du coefficient d'adsorption linéaire K_D
tableau 45	– Graphique 'box & whisker' du coefficient d'adsorption linéaire K_D 188
tableau 46	 Statistiques descriptives et de distribution du coefficient d'adsorption normalisé par le carbone organique K_{oc}
tableau 47	– Graphique 'box & whisker' du coefficient d'adsorption linéaire K _{OC} 189
tableau 48	– K _D des horizons de surface de la parcelle d'étude
tableau 49	 – K_D des horizons BT sans éléments grossiers de la parcelle d'étude.190
tableau 50	 – K_D des horizons argileux lourds avec une charge modérée en graviers siliceux et/ou de meulière. 190
tableau 51	– K _D des horizons C ou S carbonatés 191
tableau 52	 Valeurs de DT₅₀ calculées par régressions linéaires avec une concentration initiale imposée ou calculée
tableau 53	 Valeurs de DT₅₀ calculées par ajustement direct par minimisation de la RRSEP%
tableau 54	– Valeurs de DT50 calculées par minimisation de la MAEP% 195
tableau 55	 Statistiques descriptives et de distribution de la demi-vie de dégradation de l'isoproturon.
tableau 56	 Statistiques descriptives et de distribution de la demi-vie de minéralisation de l'isoproturon
tableau 57	 Graphique 'box & whisker' de la demi-vie de minéralisation de l'isoproturon
tableau 58	 Corrélations des propriétés pédologiques quantitatives entre elles. 203
tableau 59	 Coefficients de corrélation de Pearson pour la profondeur du sol (exemple pour comparaison avec le coefficient de Spearman) 204
tableau 60	 Corrélations des propriétés quantitatives pédologiques ou agronomiques entre elles
tableau 61	 Corrélations des propriétés de rétention en eau entre elles
tableau 62	 Corrélations des propriétés de rétention en eau avec les propriétés agro-pédologiques
tableau 63	 Corrélations des propriétés de conductivité hydraulique avec les propriétés agro-pédologiques
tableau 64	 Corrélations des propriétés hydrauliques avec les propriétés de rétention en eau. 207
tableau 65	– Corrélations des propriétés d'adsorption K _D & K _{OC} 208
tableau 66	 Corrélations des propriétés de dégradation et de minéralisation de l'isoproturon
tableau 67	 Analyse de la variance à un facteur contrôlé : effet des propriétés qualitatives sur le carbone organique et la masse volumique apparente

tableau 68	 Valeurs médianes de la teneur en carbone organique ou de la masse volumique apparente selon la couche de sol considérée ou selon le type de travail du sol
tableau 69	 Valeurs médianes de la teneur en carbone organique ou de la masse volumique apparente selon la classe de texture
tableau 70	 Analyse de la variance avec les propriétés qualitatives 'dérivées' : effet sur la teneur en carbone organique ou la masse volumique apparente.213
tableau 71	 Valeurs médianes de la teneur en carbone organique selon le type pédologique de sol simplifié ou selon la classe de pH. 213
tableau 72	 Valeurs médianes de la teneur en carbone organique selon la classe de teneur en CaCO₃ ou la classe de teneur en éléments grossiers.213
tableau 73	 Analyse de la variance à un facteur contrôlé : effet des propriétés qualificatives sur les propriétés hydriques du sol et les interactions sol-isoproturon
tableau 74	 Valeur médiane des propriétés bio-physico-chimiques testées selon la couche de sol considérée ou selon le type de travail du sol
tableau 75	 Valeur médiane des propriétés bio-physico-chimiques testées selon le type pédologique de sol ou selon la classe de texture
tableau 76	 Analyse de la variance avec les propriétés qualitatives 'dérivées' : effet sur les propriétés hydriques du sol et les interactions sol-isoproturon215
tableau 77	 Valeur médiane des propriétés quantitatives testées selon le type pédologique de sol simplifié ou selon la classe de pH. 216
tableau 78	 Valeur médiane des propriétés quantitatives testées selon le type pédologique de sol simplifié ou selon la classe de pH. 216
tableau 79	 Valeurs médianes de la teneur en carbone organique pour les différents groupes d'échantillons {travail du sol ; couche}
tableau 80	 Valeurs médianes de la masse volumique apparente ρ_b pour les différents groupes d'échantillons {travail du sol ; couche}
tableau 81	 Valeurs médianes de l'adsorption (K_D) pour les différents groupes d'échantillons {travail du sol ;couche} ou {travail du sol ; classe de CaCO₃}
tableau 82	 Valeurs médianes de la fraction d'eau immobile pour les différents groupes d'échantillons {couche ; classe de texture} ou {couche ; classe de pH}, ou {couche ; type pédologique simplifié}219
tableau 83	 Abréviations des noms de propriétés utilisées pour les ACP et les PLSR
tableau 84	 Propriétés qualitatives utilisées pour discriminer les valeurs de conductivité hydraulique à h = -1 cm
tableau 85	 Propriétés qualitatives utilisées pour discriminer les valeurs de K_{oc}.231
tableau 86	 Propriétés qualitatives utilisées pour discriminer les valeurs de DT₅₀.232
Partie	V Discussion & conclusions

tableau 87

tableau 88	 Proportions visées et proportions réelles des différentes classes de profondeur de sols renseignés par la carte pour l'échantillonnage 280
tableau 89	 Proportions visées et proportions réelles des différentes formations géologiques renseignées par la carte géologique pour l'échantillonnage
tableau 90	 Proportions visées et proportions réelles des différentes classes de clarté de l'image satellite
tableau 91	- Histoire géologique pré-glaciaire du site de Ouarville
tableau 92	 Histoire géologique du site de Ouarville de la période glaciaire à fin du quaternaire

Liste des équations

Partie I Étude bibliographique24

équation 1	- Masse volumique de la phase solide du sol
équation 2	- Masse volumique apparente du sol 31
équation 3	- Estimation de la porosité du sol
équation 4	 Modèle conceptuel de la masse volumique apparente de Tranter et al. (2007).
équation 5	- Teneur en eau volumique et massique du sol 40
équation 6	 Relation entre teneur en eau massique, teneur en eau volumique et masse volumique apparente41
équation 7	 Conversions de la masse 'équivalent sol sec' (M_S) à la masse de sol humide (M_{tot}) ou de M_{tot} vers M_S.
équation 8	- Application de la loi de Jurin à l'ascension de l'eau dans un pore. 41
équation 9	- Conversion d'une hauteur équivalente à une pression 42
équation 10	- Potentiel hydrique total du sol (expression simplifiée) 42
équation 11	- Le pF, une expression logarithmique du potentiel matriciel 42
équation 12	– Modèle de Brooks et Corey $\theta(h)$
équation 13	- Modèle de Campbell 1974 reformulé en θ(h)43
équation 14	 Flux en régime non saturé monodimensionnel ou tridimensionnel, d'après la loi de Buckingham-Darcy.
équation 15	Modèle de Brooks et Corey de K en fonction de h 48
équation 16	– Modèle de Campbell (1974) de K en fonction de θ
équation 17	- Modèle de Campbell (1974) de K en fonction de h (reformulé) 49
équation 18	 Équation de conservation de la masse pour un flux de soluté convectif et dispersif, monodimensionnel, en régime transitoire52
équation 19	 Équation de conservation de la masse pour un flux de soluté convectif et dispersif, monodimensionnel, en régime permanent. 52
équation 20	 Équation de conservation de la masse pour un flux convectif et dispersif de soluté adsorbé, monodimensionnel, en régime permanent

équation 21	 Séparation de la phase liquide du sol en un compartiment mobile et un compartiment immobile54
équation 22	 Bilan de masse de soluté dans les parties mobile et immobile de la phase liquide du sol54
équation 23	 Équations aux dérivées partielles des teneurs en eau mobile et immobile et de leurs concentrations en soluté
équation 24	 Relation linéaire pour l'adsorption à l'équilibre, entre Q (phase solide) et C (phase liquide).
équation 25	 Relation de Freundlich pour l'adsorption à l'équilibre, entre Q (phase solide) et C (phase liquide)58
équation 26	 Relation entre le K_D et la fraction de carbone (ou de matière) organique59
équation 27	 Modèle de diminution de la concentration d'une molécule en fonction du temps suivant une cinétique de 1^{er} ordre60
équation 28	– Relation entre la constante de dégradation k et la demi-vie DT ₅₀ 61
équation 29	 Modèle de diminution de la concentration d'une molécule en fonction du temps suivant une cinétique bi-exponentielle61

Partie II Le secteur agricole de Ouarville71

Partie III Matériels & méthodes86

équation 30	- Modèle de Campbell 1974, exprimé en $ln(\theta) = f(ln(h))$
équation 31	 Estimation de K_S avec une mesure de K_h (h ≤ 0), en connaissant les paramètres h_A et b
équation 32	 Solution approchée de Wooding 1968 du flux en régime permanent pour une infiltration axisymétrique105
équation 33	– Potentiel d'écoulement Φ défini par Gardner (1958)
équation 34	 Relation entre la sorptivité et le potentiel d'écoulement établie par White et Sully (1987)
équation 35	 Équation de Wooding reformulée en fonction de la sorptivité d'après la relation entre sorptivité et potentiel d'écoulement de White et Sully 1987
équation 36	 Estimation de la sorptivité de Philip (1969) sur les temps courts de la mesure d'infiltration
équation 37	 Estimation de la sorptivité de Philip (1969) à partir du le comportement initial de la mesure d'infiltration
équation 38	 Équation de Haverkamp <i>et al.</i> 1994 de l'infiltration en régime transitoire
équation 39	– Paramètre C2 de l'équation 38 reformulé avec le paramètre b 109
équation 40	 Linéarisation différentielle de l'équation de Haverkamp <i>et al.</i> (1994) par Vandervaere (1995), pour la détermination graphique des paramètres
équation 41	– Calcul de d.l/d. \sqrt{t} et de $\sqrt{t_{geom}}$ sur l'intervalle [i-1;i]
équation 42	– Calcul de d.l/d. \sqrt{t} et de $\sqrt{t_{geom}}$ sur l'intervalle [i-1,i+1]
équation 43	– Temps gravitaire de Philip (1969) 113
équation 44	- Temps géométrique de Philip 1969 modifié par Roulier 1999 114

équation 45 équation 46	 Temps de stabilisation de Vandervaere 2000
équation 47	– RRSEP% adaptée au régime transitoire de la mesure d'infiltration.117
équation 48	– RRSEP% adaptée au régime permanent de la mesure d'infiltration.117
équation 49	– Fonction d'erreur pour l'écart au temps de stabilisation
équation 50	 Correction apportée à la pondération des 3 composantes de la fonction d'erreur globale de l'ajustement direct.
équation 51	- Fonction globale d'erreur pondérée de l'ajustement direct 118
équation 52	- Fonction d'erreur englobant régime transitoire et régime permanent.119
équation 53	 Fonction d'erreur globale alternative intégrant le nombre de mesures concernées par le régime transitoire et le régime permanent
équation 54	 Calcul de la teneur en eau immobile pour une infiltration avec un seul traceur (Clothier <i>et al.</i>, 1992) quand les échanges par diffusion sont négligeables
équation 55	 Linéarisation de l'équation de dégradation de premier ordre par transformation logarithmique132
équation 56	- Calcul de l'intervalle de confiance sur la médiane 135
équation 57	 Critère de définition des valeurs extrêmes.
équation 58	 Calculs des paramètres Skewness et (excès de) Kurtosis
équation 59	 Calcul de la statistique W de Shapiro-Wilk137
équation 60	 Coefficients de corrélation de Pearson et de Spearman. 139
Partie IV	Résultats148
Partie V	Discussion & conclusions239
Partie VI	Annexes274
équation 61	– Erreur moyenne et moyenne de l'erreur en valeur absolue 288
équation 62	- Somme des carrés des écarts (SCE) 288
équation 63	- Racine carrée de l'erreur quadratique moyenne
équation 64	- Racine carrée de l'erreur relative au carré (1)
équation 65	- Racine carrée de l'erreur relative au carré (2) 289
équation 66	 Pourcentage d'erreur moyen en valeur absolue, MAPE
équation 67	- Centrage et réduction d'une variable 292
équation 68	- Transformation inverse négative d'une variable
équation 69	- Transformation logarithmique décimale d'une variable





THÈSE

pour obtenir le grade de

Docteur de

n°/__/__/__/__/__/__/__/__/__/

l'Institut des Sciences et Industries du Vivant et de l'Environnement

– AgroParisTech –

Spécialité : sciences du sol

Variabilité spatiale et déterminismes agro-pédologiques du devenir d'un herbicide dans l'horizon de surface



application au cas de l'isoproturon dans un secteur agricole de Beauce chartraine

présentée et soutenue publiquement par

Julien MOEYS

le 20 décembre 2007

devant un jury composé de

- M. Rafael Angulo-Jaramillo C.R. ENTPE
- M. Guy Soulas
- MME Liliane BEL
- M. Dominique **KING**
- M. Ludovic LOISEAU
- M. Yves Coquet
- D.R. INRA
- M.C. AgroParisTech
- D.R. INRA
- Dr. AFSSA
 - AFSSA examinateur AgroParisTech directeur de thèse

rapporteur

rapporteur

examinateur

examinateur

travail réalisé au sein de l'UMR 1091 INRA / AgroParisTech Environnement et Grandes Cultures, 78850 Thiverval-Grignon

Pr.



J. Moeys Annexes

Partie VI Annexes

1 terminologie

Il est nécessaire de préciser succinctement la définition de certains termes utilisés fréquemment dans ce document. Ils se réfèrent aux définitions communément admises dans la littérature, mais apportent des précisions spécifiques au travail présenté.

■ 1.1 Termes de pédologie

- **Sol** : Dans cette étude, le sol est défini selon les mêmes termes que Girard *et al.* (2005), "Le sol est une entité naturelle [...], superficielle et souvent meuble résultant de la transformation au contact de l'atmosphère et des être vivants [...] d'un matériau minéral [...] sous l'influence de processus physiques, chimiques et biologiques". Dans cette étude, le sol est le matériau meuble et structuré qui se superpose à la roche (à quelques rares exceptions près, la roche est un calcaire altéré).
- **Pédologique** : qui à trait aux sol(s). On parlera ainsi d'horizons pédologiques et de couverture pédologique (ci-dessous).
- **Pédogenèse, pédogénétique** : La pédogenèse est l'ensemble des processus contribuant à la formation, à la genèse du sol. Un processus est dit pédogénétique quand il contribue à la formation des sols.
- Horizon : Girard *et al.* (2005) définissent les horizons comme "des volumes [de sol] considérés comme homogènes [...]". On pourrait y ajouter un élément de la définition de 'strates' de De Zorzi *et al.* (2005) citée ci-dessous "dont on pense qu'elles sont plus homogènes que la population totale pour les caractéristiques étudiées", la population totale étant dans ce cas 'le sol', et les strates étant les horizons pédologiques. De la même manière, les 'caractéristiques étudiées' permettant de définir un horizon pédologique sont généralement les propriétés morphologiques (constituants et structure) et pédologiques (pédogenèse de l'horizon).
- Couverture pédologique : Girard *et al.* (2005) définissent la couverture pédologique comme : "*un objet continu et tridimensionnel [...], formée de constituants minéraux et organiques [...] ; elle est organisée en horizons qui sont eux même des volumes*". Tandis que le terme sol désigne une succession verticale d'horizons, localisée, le terme couverture pédologique désigne l'agencement tridimensionnel de ces horizons au-dessus des matériaux géologiques. La compréhension et le mode de représentation de cet agencement, forcément simplifiés par rapport à la réalité, est un enjeu essentiel de toute approche spatiale des problématiques liées au sol.
- **Soluté** : Un soluté est une substance (molécule) qui est présente, naturellement ou artificiellement, dans la solution du sol, sous forme solubilisée (dissoute). Le comportement / mouvement du soluté par rapport aux flux d'eau dans le sol dépend de ses propriétés physico-chimiques et de la manière dont il interagit avec les différentes phases du sol.
- Lixiviation : D'après le glossaire en ligne qui complète l'ouvrage de Girard *et al.* (2005) sur le site de l'A.F.E.S. : "*Transport dans la couverture pédologique, vers la profondeur et les aquifères, de substances dissoutes (nitrates, pesticides, etc.) résultant des mouvements de la phase liquide du sol*". [http://www.inra.fr/internet/Hebergement/afes//Ressources/ouvragedunod/-glossaire.php], *dernier accès novembre 2007*.

Traceur d'eau : Un traceur d'eau est une molécule appliquée au sol pour 'suivre' les

mouvements de l'eau dans ce dernier. Les propriétés attendues d'un traceur sont (i) d'être, en l'absence d'apport externe, à une concentration nulle ou négligeable dans le sol, (i) l'absence d'interaction avec la phase solide du sol (adsorption) (ii) l'absence de dégradation biologique ou physico-chimique.

Déterminisme(s) agro-pédologique(s) : Dans cette étude, les 'déterminismes' agronomiques et pédologiques d'une propriété du sol sont l'ensemble des <u>autres</u> propriétés plus élémentaires (propriétés du sol, éventuellement influencées par les pratiques agronomiques locales) qui <u>influencent</u> (déterminent) directement ou indirectement cette propriété et sa valeur lorsqu'on mesure cette propriété. Voir les « Termes relatifs aux tests statistiques » ci-dessous, quand cette propriété est vue comme une propriété d'intérêt ou une propriété à prédire.

■ 1.2 Termes spécifiques à l'étude

- Secteur d'étude de Ouarville : Secteur géographique de 2600 ha sur lequel a porté le travail présenté ici. L'emprise de ce secteur est délimité par les coordonnées extrêmes (Nord, Sud, Est et Ouest) de la carte des sols établie sur lors du 'Plan d'action pesticide' de Ouarville. Il s'agit aussi d'une sous-partie du bassin versant hydrologique alimentant le captage d'Alimentation en Eau Potable (AEP) situé à l'entrée Ouest de Ouarville. Les figure 12 et figure 13 (p. 72 et 73) présentent ce secteur.
- **Parcelle d'étude** : Parcelle de 22 ha située dans la partie nord du secteur agricole de Ouarville sur laquelle ont été menées les investigations à l'échelle parcellaire du programme ESHEL (voir à ce sujet Moeys *et al.*, 2006, Alletto *et al.*, 2006*a*, et Alletto *et al.*, 2006*b*).

■ 1.3 Termes relatifs à l'échantillonnage

- Site ; site d'échantillonnage ; site de mesure : D'après De Zorzi et al. (2005), un site d'échantillonnage est "Une aire bien délimitée où l'opération d'échantillonnage a lieu⁴¹. Pour l'étude présentée ici, un site d'échantillonnage est un lieu connu par ses coordonnées (Longitude Est et Latitude Nord, exprimées et mesurées en 'Lambert 1 carto', que j'appellerai X et Y par souci de simplicité), située au sein du secteur d'étude de Ouarville, et sur lequel des prélèvements ou des mesures ont pu être effectués.
- Extension géographique d'un site d'échantillonnage : De part (i) l'impossibilité de réaliser des mesures ou prélèvements réellement ponctuels, (ii) l'imprécision de la mesure des coordonnées par GPS et (iii) l'addition des imprécisions lorsqu'il est nécessaire de retrouver un site à l'aide d'un GPS, un site est en réalité une aire géographique de quelques mètres carrés (approximativement 10 m x 10 m) centrée sur le point de la première mesure des coordonnées géographiques.
- **Couche de sol ; couche de sol échantillonnée** : La définition d'une couche de sol se rapproche de celle de 'strate' donnée par De Zorzi *et al.* (2005) : "Une division de la population en sous populations mutuellement exclusives et exhaustives (appelée strates), dont on pense qu'elles sont plus homogènes que la population totale pour les caractéristiques étudiées¹⁴². Dans le cadre de cette étude, pour un site donné, il s'agit d'une strate de sol caractérisée par sa **profondeur minimale et maximale** (à partir de la surface du sol ; **notée Z**). C'est sur les ensembles

⁴¹ Sampling site: "A well delimited area, where sampling operations take place"

⁴² Stratification (ISO 3534-1, 1993) : "The division of a population into mutually exclusive and exhaustive sub-populations (called strata), which are thought to be more homogeneous with respect to the characteristics investigated than the total population"

[site:couche de sol] qu'ont porté les mesures et échantillonnages. Deux éléments sont entrés en ligne de compte pour définir une couche de sol : (i) la **délimitation des horizons du sol** lors d'un sondage tarière, (ii) la **délimitation verticale** des différentes couches de l'horizon travaillé créées sous l'effet du travail du sol ou du semis.

- Point d'échantillonnage; point de mesure : D'après De Zorzi et al. (2005), un point d'échantillonnage est "l'endroit / le point où l'échantillonnage a lieu dans le site d'échantillonnage^{r43}. Dans le cadre de cette étude, il s'agit du point (éventuellement localisé en longitude, latitude et profondeur à partir de la surface du sol) sur lequel a porté l'échantillonnage ou la mesure, au sein d'une couche de sol, pour un site donné.
- Échantillon de sol : D'après De Zorzi et al. (2005), un échantillon est "une portion de matériau sélectionnée à partir d'une plus grande quantité de matériau"⁴⁴. Dans cette étude, il s'agit du sol issu d'un prélèvement sur un site donné, une couche de sol donnée, à une date donnée. Dans l'étude présentée ici, les échantillons ont été prélevés sur une surface très réduite (0,25 m par 0,15 m) et non par un prélèvement groupé issu de plusieurs - effectués sur le site, afin de ne pas minimiser la variabilité spatiale des propriétés mesurées.

■ 1.4 Termes relatifs aux modèles

Une partie des termes peut aussi être utilisée dans un cadre statistique (modélisation d'une variable, en dehors d'un programme informatique de processus). Le terme de 'variable' employé ici peut aussi faire référence à une 'propriété' du milieu modélisé.

- **Constante** : "Quantité dont la valeur est connue précisément"⁴⁵, définition traduite de **STOWA-RIZA** (1999).
- Variable : "Quantité dont la valeur peut changer"⁴⁶, définition traduite de STOWA-RIZA (1999).
- Variable indépendante : D'après STOWA-RIZA (1999) "variable en fonction de laquelle les changements d'un système dynamique sont décrits; e.g. le temps, les 3 dimensions de l'espace"⁴⁷.
- Variable dépendante : D'après STOWA-RIZA (1999), "variable qui change en fonction de une ou plusieurs variables indépendantes".
- Variable auxiliaire : d'après STOWA-RIZA (1999) : "variable dont la valeur n'est pas dépendante de la valeur d'une variable indépendante (e.g. pas dépendante de sa valeur à un temps précédent)". En pratique, il s'agit d'une variable qui peut varier dans le temps et dans l'espace mais qui ne varie pas 'en fonction' du temps et de l'espace.
- **Conditions aux limites** : Les conditions aux limites sont la **description quantitative** des conditions appliquées aux limites **supérieure** (généralement l'atmosphère), **inférieure** (généralement la zone saturée ou non au-delà de la zone d'intérêt), ou éventuellement **latérale ou même internes** (fossés, drainage) du système. Elles incluent ainsi les précipitations, l'évapotranspiration, les températures, et les conditions de potentiel (ou de hauteur de nappe). Ces conditions peuvent varier dans le temps (ce qui est généralement le cas de la limite supérieure) et/ou dans l'espace. Il s'agit de variables dépendantes, mais elles sont choisies par

⁴³ Sampling point: "The place where sampling occurs within the sampling site"

⁴⁴ Sample (IUPAC, 1990; ISO 11074-2, 1998) : "A portion of material selected from a larger quantity of material".

^{45 &}quot;constant : a quantity whose value is accurately known".

^{46 &}quot;variable : quantity whose value may change".

^{47 &}quot; independent variable : variable versus which changes in a dynamic system are described; e.g. time, three spatial dimension ".

l'utilisateur ou calées sur des mesures in-situ.

- Variable de forçage : Le terme est utilisé dans la littérature, mais n'est pas clairement défini (STOWA-RIZA, 1999, p. 39). Une variable de forçage d'un modèle est une variable dont la valeur change au cours du temps, et éventuellement dans l'espace, mais dont la valeur ne dépend pas des résultats du modèle à un temps précédent. Les conditions aux limites sont des variables de forçage.
- Paramètre : D'après STOWA-RIZA (1999) : "quantité qui est supposée constante, mais dont la valeur n'est pas connue exactement". Dans ce document, un paramètre est une variable dépendante de l'espace, mais pas du temps. L'évolution éventuelle au cours du temps de la variable n'est pas prise en compte, pour des raisons de simplification ou d'adéquation entre l'échelle temporelle de modélisation et l'échelle temporelle de variation du paramètre.
- Variable d'état ; état du système : "état : un groupe de variables du système, considéré à un temps spécifique, qui contient toutes les informations du passé pertinentes pour [prédire] le futur du système" (STOWA-RIZA, 1999). Cette définition englobe les paramètres du système, mais dans ce document, le terme de variable d'état sera utilisé comme une variable dépendante du temps (et éventuellement de sa localisation dans l'espace) et des résultats de la modélisation aux temps précédents, qui est utilisé pour la modélisation au temps suivant avec l'aide des variables de forçage et des paramètres.
- **État initial** : de la même manière qu'il faut définir les conditions aux limites du système, et leur variation dans le temps et/ou l'espace, il est nécessaire à l'utilisateur de définir la valeur des variables d'état au sein du système au temps initial (t(0) de modélisation). L'état initial peut varier dans l'espace.
- **Propriétés (du sol, d'une molécule)** : Le terme 'propriété du sol' ou 'propriété de la molécule' est employé ici dans un sens large, pouvant s'appliquer à une constante, une variable ou un paramètre spécifique au sol ou à la molécule considéré.
- Paramétrisation (d'un modèle) : La paramétrisation d'un modèle consiste à fixer l'ensemble de ses caractéristiques nécessaires pour effectuer une modélisation. Cela inclut donc le choix des conditions aux limites et de leur évolution dans le temps (variables de forçage), la valeur des variables d'état au temps initial et la valeur des paramètres. Cette paramétrisation peut être modulée dans l'espace.
- **Calibration d'un modèle** : D'après Refsgaard et Henriksen (2004) : « *Procédure d'ajustement de la valeur de paramètres d'un modèle pour reproduire la réponse réelle [...]* »⁴⁸. La calibration d'un modèle consiste utiliser des valeurs mesurées de variables de sorties du modèle (connues) pour estimer certains de ses paramètres (inconnus). Suivant la complexité des modèles, il existe plusieurs approches de calibration. La plus courante est la calibration d'un modèle statistique sur des données observées (ex : estimation de la pente et de l'ordonnée à l'origine d'une régression linéaire du coefficient d'adsorption de l'isoproturon en fonction de la teneur en carbone organique du sol). La 'modélisation inverse' fait aussi partie de procédures de calibration (ex : estimation des propriétés de rétention en eau du sol à partir d'une modélisation inverse HYDRUS 1D et des volumes d'eau collectés à la base d'une colonne de sol).

^{48 &}quot;Model calibration: The procedure of adjustment of parameter values of a model to reproduce the response of reality within the range of accuracy specified in the performance criteria"

■ 1.5 Termes relatifs aux tests statistiques

Comme dans le paragraphe précédent, le terme de **'variable**' employé ici peut aussi faire référence à une **'propriété**' du milieu étudié.

- Variable explicative ; variable expliquée : Deux variables présentant des variations concomitantes (corrélations) et dont on sait (ou on suppose) que la valeur de l'une (variable explicative) affecte la valeur de l'autre (valeur expliquée) par un lien de cause à effet.
- Variable prédictive ; variable prédite : quand deux variables présentent des variations concomitantes qu'on parvient à modéliser (par un modèle statistique généralement, ou un modèle informatique), on peut utiliser l'une (variable prédictive) pour prédire l'autre (variable prédite) avec une précision dépendant de la qualité de la relation entre les deux variables. Cette opération ne présuppose pas de lien de cause à effet. En général la variable prédite est une variable dont la mesure demande plus de moyens que la variable prédictive (principe des fonctions de pédotransfert).
- Variable d'intérêt : dans ce document, une variable d'intérêt est une variable qui présente un intérêt direct et indispensable pour l'étude (nécessaire au modèle par exemple).
- Variable secondaire : dans ce document, une variable secondaire est une variable qui ne présente pas un intérêt direct et indispensable pour l'étude, mais qui permet soit (i) de prédire et éventuellement d'expliquer une variable d'intérêt, avec un rôle variable prédictive, voir explicative (ii) de définir le contexte de l'étude (contexte pédologique, contexte agronomique) et éventuellement d'estimer le domaine de validité (géographique, pédologique) des résultats obtenus.

■ 1.6 Termes de programmation

- Langage de programmation interprété : Un langage de programmation interprété est un langage de programmation qui n'a pas besoin d'être compilé (transformé en fichier autonome exécutable) pour être exécuté. Un logiciel dit 'interprète' lit ou reçoit les commandes données par l'utilisateur et les traduit en instructions pour l'ordinateur. Un tel langage à l'avantage d'être généralement plus facile à mettre en œuvre, multiplateformes (e.g. MS Windows, Linux, Mac OS), mais l'inconvénient d'être (beaucoup) plus lent que les langages compilés (comme le C ou le Fortran).
- Script : Fichier au format texte contenant des commandes dans un langage de programmation interprété. Le programme dit 'interprète' lit / importe les commandes contenues dans le script et les traduit en instructions pour l'ordinateur. L'utilisation de scripts permet de garder une trace des commandes passées par l'utilisateur à l'interprète' et permet d'éviter d'avoir à les saisir une par une à chaque exécution.
- R : Langage de programmation interprété dédié aux calculs de statistiques et à la création de graphiques. Il a été développé à partir du 'standard' 'S' établi par les laboratoires Bell de AT&T. Ce langage est sous Licence Publique Générale GNU (GPL). Les fonctionnalités de R peuvent être étendues par des 'packages' (fonctions additionnelles) développés par des utilisateurs.

2 Stratification de l'échantillonnage : objectifs

■ 2.1 Type de sol

Type de sol	Objectif [-]	Proportion de la grille [-]
R	0.100	0.0117
Ca	0.125	0.0771
Ci	0.125	0.0611
В	0.100	0.0542
NL	0.300	0.4779
L	0.250	0.0318

tableau 87 – Proportions visées et proportions réelles des différents types de sols renseignés par la carte pour l'échantillonnage.

Avec R: RENDOSOL ou Rendisol; Ca: CALCOSOL; Ci: CALCISOL; B: BRUNISOL; NL: NÉOLUVISOL; L: LUVISOL.

■ 2.2 Classe de profondeur

Classe de profondeur	Objectif [-]	Proportion de la grille [-]
1	0.05	0.0006
2	0.05	0.0114
3	0.10	0.0666
4	0.35	0.4240
5	0.20	0.2300
6	0.25	0.2675

tableau 88 – Proportions visées et proportions réelles des différentes classes de profondeur de sols renseignés par la carte pour l'échantillonnage.

■ 2.3 Formation géologique

Formation géologique	Objectif [-]	Proportion de la grille [-]
LP	0.700	0.8311
LP_m1b	0.010	0.0100
inconnu	0.025	0.0250
m1a1	0.105	0.1050
m1a2	0.150	0.1500

tableau 89 – Proportions visées et proportions réelles des différentes formations géologiques renseignées par la carte géologique pour l'échantillonnage.

Avec LP : Limon des plateaux ; LP_m1b : Limon des plateaux recouvrant une formation du Burdigalien (Sables de Lozère) ; m1a1 : marne de Voise ou calcaire de Berchère ; m1a2 : calcaire de Beauce ; inconnu : hors de la carte utilisée.

J. Moeys Annexes

Classe de clarté	Objectif [-]	Proportion de la grille [-]
0	0.0062	0.0061
1	0.1681	0.1681
2	0.0017	0.0017
3	0.0013	0.0013
4	0.0428	0.0428
5	0.2067	0.2067
6	0.2687	0.2687
7	0.1362	0.1362
8	0.1101	0.1101
9	0.0365	0.0365
10	0.0217	0.0217

2.4 Classe de clarté sur une image satellite

tableau 90 – Proportions visées et proportions réelles des différentes classes de clarté de l'image satellite.

■ 2.5 Distance entre les sites

La distance moyenne entre les sites d'échantillonnage est évaluée par une matrice des distances, qui présente en ligne et en colonne la liste des sites d'échantillonnages retenus. La cellule à l'intersection de la ligne d'un échantillon A et de la colonne de l'échantillon B contient la distance [AB]. Seul le triangle supérieur ou inférieur de la matrice, hors diagonale, est utilisé afin d'éviter les redondances et les distances d'un point avec lui-même.

La distance moyenne doit être la plus élevée possible. La limite inférieure possible de cette distance correspondrait à un échantillonnage suivant une grille régulière. Mais la distance moyenne est forcément supérieure à celle-ci du fait des autres éléments entrant dans la stratification de l'échantillonnage (cf. ci-dessous).

La distance moyenne entre les sites (moyenne des distances de point à point) visée est de 2911 mètres (ce qui correspond à une grille régulière de 10 x 10 points)

■ 2.6 Pondération des différents critères

Les différents critères ont été pondérés de manière à ajuster leur importance respective : Le type pédologique a été pondéré à 10, la classe de profondeur de sol à 5 et la formation géologique et la classe de clarté à 1.

La distance moyenne a une pondération de 1, comme la formation géologique et la classe de clarté.

3 Protocoles de mesure

■ 3.1 Masse volumique apparente au cylindre



figure 95 – Modalité de prélèvement des cylindres de sol non perturbés pour les masses volumiques apparentes.

Les éléments figurés dans la phase A sont, de haut en bas, (a) le maillet ; (b) une pièce de bois destinée à amortir les coups de maillet et protéger les pièces métalliques de l'embase ; (c) une embase métallique qui s'emboîte dans le cylindre ; (d) le cylindre d'acier biseauté ; (e) le sol prélevé. Source : J. Moeys / INRA d'Orléans, 2004, *non publié*.

Le protocole décrit ci-dessous suit globalement la norme NF ISO 11272, de septembre 1998 (X 31-556) (AFNOR, 1998*c*), intitulée « Détermination de la masse volumique apparente sèche » (méthode au cylindre). Le nombre de répétitions préconisé (6) pour chaque couche de sol n'a pas été suivi (3 répétitions seulement).

Du fait de la présence d'éléments grossiers dans le sol, la méthode de détermination « à l'eau » ou « au sable » aurait été plus pertinente. Mais des essais préliminaires de la méthode à l'eau ont montré qu'elle était trop longue à mettre en œuvre par rapport au temps disponible. La méthode du densitomètre à membrane n'est pas pertinente quand les sols sont saturés, car il y a risque de tassement des parois par la membrane caoutchouc.

La mesure de la masse volumique apparente porte, dans cette étude, sur le lit de semence ou sur le reste de l'horizon travaillé. Si la mesure porte sur le reste de l'horizon travaillé, il faut d'abord retirer le sol se situant au-dessus de la couche à prélever, à l'aide d'une petite pelle, en veillant à ne pas tasser le sol qui se trouve endessous. On procède donc en arrachant la terre ou en la découpant parallèlement à la surface du sol.

Environ un centimètre au-dessus de la profondeur à prélever, on effectue un dégagement plus fin du sol, à l'aide d'un long couteau, jusqu'à obtenir une surface à peu près horizontale et plane (c'est à dire dont la rugosité ne dépasse pas 1 à 2 millimètres). Son étendue doit dépasser de quelques centimètres celle du cylindre. Les particules de sol qui dépassent doivent être tranchées horizontalement ou arrachées. Si le sol n'est pas excessivement humide, il est possible d'affiner ce travail à la main en 'pelant' les petites particules de sol délicatement. Si des racines dépassent ou entravent l'arrachement des particules, il est nécessaire de les trancher au couteau ou avec une paire de ciseaux.

Le cylindre est ensuite posé sur la surface ainsi préparée. Deux dimensions de cylindres ont été utilisées : des cylindres de 8,4 cm de diamètre intérieur et 9,2 cm de haut ('grands cylindres'), et des cylindres de 5 cm de diamètre intérieur pour 5 cm de haut ('petits cylindres'). Les premiers ont un volume de 510 cm³, les seconds un volume de 100 cm³. La partie basse des deux types de cylindres, celle qui est posée sur le sol, est biseautée de manière à ce que la terre soit tranchée lors de l'enfoncement du cylindre (et non poussée, ce qui perturberait le prélèvement).

Le diamètre intérieur des grands cylindres est réduit de 1 mm à la base de ce dernier, sur un centimètre de haut, de manière à limiter la surface de contact entre le cylindre et le sol lors du prélèvement. La force de cisaillement exercée par le cylindre sur le sol lors du prélèvement peut en effet provoquer un tassement du sol sous le cylindre et à l'intérieur de celui-ci. Les cas où de tels phénomènes se produisent sont repérables visuellement : lorsque le haut du cylindre atteint la surface du sol (autour du cylindre), le niveau du sol dans le cylindre est plus bas, ce qui montre que le sol s'est tassé à l'intérieur (ce qui est sans conséquence sur la masse volumique apparente) et/ou qu'il s'est tassé sous le cylindre (tout le volume initial du sol n'a pas été prélevé, une partie reste en dessous et la masse volumique est alors sous-estimée, de même que la teneur en eau volumique).

Une fois posé sur la surface arasée, le cylindre est ensuite enfoncé dans le sol. Cela peut être effectué à la main, si le sol est suffisamment humide, en exerçant une pression verticale sur le cylindre. Si le sol n'est pas proche de la saturation, une embase métallique est posée sur le rebord supérieur du cylindre. Cette dernière a le même diamètre intérieur, mais elle est plus large que le cylindre. Elle permet de fermer le dessus du cylindre, et de l'enfoncer un peu au-delà de la surface du sol, du fait de son volume intérieur. Une embase a été utilisée pour les petits cylindres, mais pas pour les grands (faute d'en avoir une). Une pièce de bois est posée sur l'embase ou directement sur le cylindre, et le cylindre est enfoncé en appliquant des coups de maillets d'intensité modérée, au centre de la pièce de bois.

Une fois complètement enfoncé, le cylindre et le sol qu'il contient sont dégagés en excavant le sol qui se trouve autour, en dégageant une partie du sol située à un niveau inférieur à la base du cylindre (mais pas sous le cylindre). Le cylindre est alors extrait en tranchant horizontalement la terre à 1 cm en dessous, à l'aide d'un long couteau.

La terre dépassant de part et d'autre du cylindre doit être arasée au couteau, comme lors de la préparation de la surface. Une fois le cylindre arasé, son contenu est soigneusement vidé dans un sac plastique de type 'Ziplock', qui est ensuite fermé hermétiquement et dûment annoté.

En cas de **blocage de l'enfoncement du cylindre par un élément grossier**, ou en cas d'**effondrement du sol au prélèvement** du fait d'une **structure trop peu cohérente**, le prélèvement a été recommencé jusqu'à être satisfaisant.

L'échantillon de sol prélevé est ensuite ramené au laboratoire. Il est placé dans une barquette en aluminium ou un récipient en porcelaine de poids connu, et pesé (ce qui donne le poids de sol humide). Les barquettes de sol sont placées dans une étuve à 105°C ventilée, pendant 48 h. Après ce délai, les barquettes de sol sont sorties de l'étude, refroidies à l'air libre jusqu'à une température compatible avec une manipulation à la main et pesées (ce qui donne le poids de la phase solide du sol). Une pesée des échantillons à trop haute température perturbe la mesure.

La masse volumique apparente de chaque couche de sol a été caractérisée, par le prélèvement d'un grand cylindre et deux petits, soit 3 répétitions. Les résultats obtenus avec les grands cylindres et avec les petits sont généralement tout à fait comparables. Les premiers sites mesurés ont parfois eu moins de prélèvements, du fait de la mise au point méthodologique.

■ 3.2 Mesure de la relation $\theta(h)$ – Presses de Richards

Prélèvement de cylindres de sol non perturbés

Les échantillons de sol utilisés pour cette mesure sont des **prélèvements au cylindre non perturbés. Le mode de prélèvement est quasiment identique à celui utilisé pour les masses volumiques apparentes au cylindre** (voir p. 97). Les échantillons de sol non perturbés destinés aux mesures de rétention en eau ont été prélevés en même temps que les masses volumiques apparentes et que les mesures d'infiltration. Les cylindres sont de taille différente de celle des cylindres à masse volumique apparente : ils mesurent 5 cm de diamètre intérieur pour une hauteur de 2,5 cm, soit un volume de 49 cm³. Le prélèvement est assisté par une embase supérieure prolongée d'une tige métallique le long de laquelle vient glisser une masse mobile destinée à 'percuter' le cylindre. Une fois le prélèvement réalisé, le cylindre est partiellement arasé, mais n'est pas vidé, puis protégé de deux capuchons plastiques, et placé dans un sac de type 'Ziplock' hermétique. Tous les cylindres de prélèvement sont numérotés et leur poids est connu. De retour du terrain, les échantillons sont placés dans une chambre froide à 4°C, dans des boit es rigides destinées à éviter tout tassement accidentel, en attendant la mesure de rétention en eau.

Pour chacune des 50 couches de sol à caractériser, un seul prélèvement de sol non perturbé a été réalisé pour la mesure de rétention en eau (pas de répétitions).

 Humectation et saturation en eau des échantillons de sol non perturbés

Avant d'être humectés, les échantillons de sol sont dégagés de leurs emballages et arasés plus finement, de manière à obtenir une surface supérieure et inférieure la moins rugueuse possible (rugosité < 1 mm).

Ils sont pesés avant leur humectation. Connaissant le poids du cylindre, on en déduit le poids de sol humide (*uniquement utilisé pour des contrôles a posteriori*).

Le cylindre est posé sur grille plastique fine mais relativement rigide. Cette dernière est destinée à prévenir un effondrement ou une désagrégation partielle des cylindres lorsqu'ils sont manipulés par la suite. Cette grille est numérotée, elle a un poids sec et un poids 'humide' connu (eau retenue entre les mailles).

Les cylindres sont ensuite posés sur un bac à humectation. Ce bac est composé d'un lit de 3 à 4 cm de billes de verres de 45-90 µm de diamètre recouvert de deux épaisseurs de toile de nylon très fines du même type que celle utilisée pour les infiltromètres. Le fond de ce bac est connecté par un tuyau à un réservoir d'eau dont le niveau supérieur est situé sous le niveau supérieur du lit de bille de verre. De cette manière, l'eau à la surface du lit de billes de verre est à un potentiel légèrement négatif. Les cylindres de sol sont posés sur la toile de nylon, avec leur grille plastique. Le fait que le potentiel de l'eau à la surface du bac soit inférieur à la saturation prévient l'effondrement du sol par une saturation trop rapide (éclatement des agrégats). Les cylindres de sol sont laissés à humecter pendant 48 h. Pendant ces 48 h, le niveau d'eau du réservoir est progressivement remonté jusqu'au niveau supérieur du lit de billes de verre. Quelques minutes avant la mesure, le niveau d'eau est monté un peu au-dessus afin d'achever la saturation des échantillons.

Les échantillons sont ensuite prélevés un par un avec une spatule plate et pesés avec leur grille plastique (dont le poids humide est connu), ce qui évite leur effondrement. On obtient ainsi le poids de l'échantillon à saturation (h = 0 m).

Mesure de la teneur en eau à un potentiel imposé

Une fois pesés, les échantillons sont posés sur une plaque en céramique de même forme que les presses. Les plaques en céramique ont un point d'entrée d'air à pF 3,75 (#1600) et supérieur à pF 4,18 (#1500)⁴⁹. Cette plaque en céramique a été au préalable saturée en eau un minimum de 12 heures. La face inférieure de la plaque est fermée par une pièce de caoutchouc souple. Un petit drain, connecté à un capillaire en plastique, traverse la plaque est permet d'évacuer l'eau en excès emprisonnée entre la base de la plaque et le caoutchouc. La face supérieure de la plaque a été enduite d'une fine couche de pâte humide de kaolin de 2 mm d'épaisseur. Les échantillons sont posés sur cette pâte sur la plaque. La pâte est destinée à assurer un contact optimal entre les échantillons posés dessus et la plaque de céramique.

La plaque et les échantillons posés dessus sont placés dans la presse. Le drain et son capillaire sont branchés à un tuyau métallique permettant d'évacuer l'eau en excès vers l'extérieur de la presse. La presse est refermée et verrouillée. Un conduit métallique la relie au compresseur et au manomètre, ce qui permet d'imposer une pression donnée au-dessus de la plaque (choisie d'abord égale à 1 m). Sous l'action de la pression, l'eau du sol en excès⁵⁰ sort de l'échantillon, passe dans le kaolin et à travers la plaque en céramique jusqu'à la membrane de caoutchouc, et est évacuée vers l'extérieur par le drain. Ce processus s'étale sur plusieurs jours. Quand l'écoulement d'eau à l'extérieur de la presse cesse, le sol peut être considéré comme à l'équilibre. Cela se produit entre 24 et 48 h après le début de la mise en pression (pour les échantillons testés).

Après cette opération, la presse est remise à la pression atmosphérique, et les échantillons sont sortis pour être pesés. Cette pesée donne le poids de l'échantillon au potentiel imposé (h = -1 m).

Après cette pesée les échantillons sont replacés dans la presse et l'opération est recommencée à une pression de 160 m.

■ Séchage à 105°C et mesure du poids sec

Une fois les mesures en presse terminées, les échantillons sont placés dans une étuve à 105°C durant 48 h. Ils sont ensuite pesés, ce qui permet d'obtenir le poids sec des échantillons (masse de la phase solide). Cette masse connue, il est ensuite possible de déduire les masses d'eau à saturation, à h = -1 et -160 m, ainsi que les teneurs en eau massiques et volumiques aux mêmes potentiels.

Ces mesures sont utilisées pour déduire les paramètres h_A et b de l'équation 30 (θ_{SAT} étant mesuré directement).

⁴⁹ 80 et 220 psi.

⁵⁰ L'eau du sol qui est retenue à une succion trop faible pour compenser la pression imposée.

4 Précisions sur l'organisation et la gestion des données

■ 4.1 Stockage et organisation des données

L'ensemble des mesures effectuées lors de cette étude ont été organisées et stockées dans **deux bases de données distinctes** : une base de donnée pour les sondages tarière et une base de donnée pour les autres mesures. Ces bases ne sont <u>pas</u> des systèmes d'information géographique à part entière, mais elles contiennent une **information géoréférencée**.

Base de données des mesures

Toutes les mesures effectuées, à l'exception des sondages tarière, ont été stockées dans une base de données dédiée, élaborée avec le logiciel MS Access (Microsoft® Access 2000). Il serait inopportun de décrire la base en détail ici, mais le point central de la base est le tandem 'table sites' – 'table couches/échantillons'. Le site est une aire géographique définie, qui comporte plusieurs couches (lit de semence – reste de l'horizon travaillé) sur lesquelles les différentes mesures in situ ou les différents prélèvements (= échantillons) pour les mesures de laboratoire ont porté. Les mesures et les prélèvements peuvent avoir des coordonnées géographiques spécifiques, mais ils sont rassemblés par sites et par couches.

A partir de cette base site – couche, l'ensemble des données **brutes** a été organisé et stocké dans différentes tables (*non détaillées ici*).

Les principaux avantages de cette approche sont (1) la localisation unique des données sources, plus sure que de multiples fichiers (2) la spécification des relations entre les différentes données / tables, qui offre la possibilité d'effectuer les calculs de base par requêtes, ce qui permet d'avoir une actualisation immédiate de ces dernières (3) la possibilité d'effectuer des requêtes de synthèse permettant de rassembler les différents résultats de mesure sur les différentes couches en une même table (4) la possibilité de réaliser des traitements par 'scripts' à partir d'une même source de données (5) la possibilité d'intégrer ces données dans un Système d'Information Géographique plus complet.

Base de données des sondages tarière

Les données des sondages tarière ont été stockées dans une base de donnée dédiée, dérivée d'une base élaborée par Moeys (2003), entièrement refondue et adaptée aux informations notées sur les fiches de sondages tarière de Cabinet Veillaux (2000) et la fiche présentée en annexe (figure 97, p. 303). La base (relationnelle) s'organise à partir des catégories/tables suivantes **'table études' > 'table sites' > 'table sondages' > 'table horizons' > 'table teneurs en éléments grossiers'**. La clef de voûte de ce système est la distinction entre **sites et sondages**. Cette distinction n'est pas indispensable pour les informations spécifiques aux sondages tarière, mais elle est essentielle pour créer des requêtes permettant de rassembler les résultats de plusieurs mesures (cf. ci-dessus). Delmas (2007) a présenté cette base un peu plus en détail.

Les identifiants uniques et les numéros des sites sont identiques entre les deux bases sondages et mesures. Les raisons de la séparation des données en deux bases

de données distinctes – stratégie *a priori* non recommandée – sont d'ordre pratique : les données sur les sondages tarière devaient être utilisées dans d'autres volets du programme ESHEL, par d'autres utilisateurs (Delmas, 2007).

■ 4.2 Traitement des données

La quasi-totalité des traitements de données⁵¹ et des calculs et tests statistiques ont été réalisés en utilisant des scripts en langage de programmation statistique R (R Development Core Team, 2006). L'utilisation des scripts ne rend pas les calculs 'automatiques', mais il permet de les répéter à l'identique rapidement et facilement. Le programme R permet d'extraire les informations directement de la base de donnée, et il permet aussi d'**inscrire les résultats de synthèse les plus importants dans la base de données** (dans des tables séparées, mais qui peuvent aussi être reliées aux autres tables). Les autres résultats 'intermédiaires' sont produits sous forme de fichiers textes, de fichiers au format 'pdf' comportant des informations textuelles et des graphiques, de graphiques au format image, ou d'objets R (.Rdata). Cela permet un examen minutieux des résultats.

Les principaux avantages de cette stratégie sont :

- L'intégration des différentes étapes de calculs pour les différentes mesures, de la donnée brute à la donnée traitée. Cette intégration est partielle, car tous les résultats ne sont pas régénérés automatiquement à la suite d'une modification des données ou des calculs, mais elle permet de refaire tout ou partie des traitements rapidement et de manière fiable.
- La répétabilité des calculs, que ce soit d'une mesure à une autre ou lors de l'actualisation d'un traitement.
- La possibilité d'utiliser des conditions dans les calculs (si telle mesure est supérieure à ..., effectuer ...; si le calcul sur tel intervalle de temps ne répond pas à la condition X, tester un autre intervalle)
- Réduire au minimum les effets 'opérateur' dans les calculs : quand un calcul offre plusieurs possibilités, il est possible de les tester tous, de noter la qualité des résultats et éventuellement d'en choisir un selon des critères précis et fixes.
- Identifier les points critiques (choix de l'opérateur, échec de la méthode dans certaines conditions) et définir des règles précises pour les résoudre, identiques pour toutes les mesures.
- La facilité de réaliser empiriquement des études de sensibilité des résultats finaux aux méthodes de calcul employées, et aux erreurs sur les données brutes (possibilité non exploitée dans ce travail).

L'utilisation des bases de données et des scripts de traitements **pose aussi plusieurs problèmes**: (i) il est difficile de documenter correctement les bases de données et le code des scripts (malgré une utilisation intensive des commentaires); (ii) certaines erreurs de calcul restent difficiles à repérer, malgré le fait qu'elles portent de fait sur toutes les mesures. Une validation sur des calculs indépendants est donc indispensable (iii); la masse d'information produite est considérable (iv); des trois points précédents, il ressort que la transmission des données est aussi critique que sans l'utilisation des bases de données et des scripts (connaissance du langage de programmation notamment). Malgré tout, à problèmes comparables, cette approche intégrée permet d'aller beaucoup plus loin dans les traitements et les calculs.

⁵¹ Calculs destinés à passer d'une information brute, directement dérivée d'une mesure, aux paramètres d'intérêt des processus. Par exemple le passage d'une infiltration cumulée à une valeur de conductivité hydraulique et de sorptivité.
Qualité des ajustements : les fonctions d'erreur

Lorsque l'on ajuste une fonction mathématique sur des données mesurées, il est nécessaire de déterminer la qualité de l'ajustement. Plusieurs paramètres permettent cela. Le plus courant est le coefficient de corrélation linéaire de Pearson, noté R, ou sa valeur exprimée au carré, le coefficient de détermination R², dont les valeurs s'étalent entre 0 et 1 (0 étant une absence de corrélation, 1 une corrélation parfaite).

Mais la mesure du degré de corrélation linéaire entre une variable mesurée et sa valeur prédite ne prend pas en compte les biais systématiques qui peuvent exister, d'où l'intérêt des fonctions d'erreur, basées sur l'écart entre la valeur réelle et la valeur prédite. On peut ainsi mesurer l'écart moyen ou la moyenne des valeurs absolues des écarts, qui présentent l'avantage d'être exprimés dans la même unité de mesure que la variable étudiée, mais l'inconvénient d'être modérément sensibles aux écarts entre mesure et estimation les plus extrêmes.

$$erreur moyenne = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (y_{i,est} - y_{i,mes}) \qquad erreur moyenne \ absolue = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} |(y_{i,est} - y_{i,mes})|$$

équation 61 – Erreur moyenne et moyenne de l'erreur en valeur absolue.

Avec $y_{i,est}$ la i^e valeur de la variable y estimée (par une fonction de prédiction) et $y_{i,mes}$ la i^e valeur = mesurée (observée) de la variable y ; n est le nombre de paire {observations:estimations}.

L'erreur moyenne est une mesure du biais, comme les surestimations et les sousestimations se compensent, tandis que la moyenne des erreurs en valeur absolue mesure la qualité de l'ajustement.

Les fonctions d'erreur basées sur la somme des carrés des écarts (SCE) sont plus sensibles aux écarts extrêmes et aux biais éventuels.

$$SCE = \sum_{i=1}^{n} (y_{i,mes} - y_{i,est})^2$$

équation 62 – Somme des carrés des écarts (SCE).

5.1 Racine carrée de l'erreur quadratique moyenne

La racine carrée de la moyenne des erreurs au carré, souvent appelée *Root Mean Squared Error of Prediction* (RMSEP), se calcule comme suit :

$$RMSEP = \sqrt{\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^{n} (y_i - y_{i, est})^2}$$

équation 63 – Racine carrée de l'erreur quadratique moyenne.

C'est une fonction d'erreur couramment utilisée, mais il est parfois difficile de comparer les ajustements entre eux (e.g. entre différents échantillons) si ces derniers ont des valeurs moyennes (valeurs moyenne de y), voire des ordres de grandeur sensiblement différents.

■ 5.2 Racine carrée de l'erreur relative au carré

Erreur relative à l'importance de la variable

La racine carrée de l'erreur relative au carré, ou *(Root)* Relative Squared Error of *Prediction* (RRSEP ; encore appelée *Relative Standard Error of Prediction*), est calculée selon la formule suivante :

$$RRSEP = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n} (y_{i,mes} - y_{i,est})^{2}}{\sum_{i=1}^{n} (y_{i,mes})^{2}}}$$

$$RRSEP\% = RRSEP$$
. 100

équation 64 – Racine carrée de l'erreur relative au carré (1).

Avec $y_{i,mes}$ valeur de la variable y mesurée au temps t(i) et $y_{i,est}$ la valeur de la variable y estimée par la fonction au temps t(i). Elle peut être exprimée en % de la valeur moyenne de la variable y.

On voit qu'il s'agit d'une normalisation de l'erreur au carré, qui est exprimée comme une fraction (potentiellement > 1) de la valeur de la variable au carré. Son principal avantage est de permettre des comparaisons entre échantillons, voire pour différentes variables étudiées.

Erreur relative à l'importance du résidu de la variable

Il existe un deuxième mode d'expression de la racine carrée de l'erreur relative au carré, toujours appelée RRSEP :

$$RRSEP = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n} (y_{i,mes} - y_{i,est})^{2}}{\sum_{i=1}^{n} (y_{i,mes} - \bar{y})^{2}}}$$

avec

$$\bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} y_{i,mes}$$

équation 65 – Racine carrée de l'erreur relative au carré (2).

Avec $\bar{\mathcal{Y}}$ la moyenne des y_i mesurés.

Dans ce cas l'erreur carrée n'est plus normalisée par la valeur de la variable y au carré, mais par l'écart entre la variable y et sa moyenne au carré. C'est donc l'amplitude des variations de y autour de sa moyenne (variabilité) qui sert de référence.

C'est l'équation 64 de la RRSEP qui a été utilisée dans les calculs.

Si la RRSEP permet de comparer la qualité des ajustements entre les échantillons, elle a tendance à privilégier, pour une même cinétique de dégradation, les mesures présentant une quantité de molécule élevée par rapport à celles qui présentent une quantité faible (au dénominateur comme au numérateur de l'équation). La RRSEP pénalise plus des erreurs aux concentrations élevées, et moins les erreurs aux concentrations basses. Or, dans certains cas de figure, il peut être important d'avoir une prédiction de qualité équivalente aux concentrations élevées ou basses. A long terme, sous-estimer la teneur résiduelle en molécule peut amener à sous-estimer le risque de lixiviation tardive de cette dernière.

Pour cette raison un autre calcul d'erreur a été testé, qui se base sur la valeur moyenne des erreurs relatives au carré, et non sur la valeur relative des erreurs au carré. Elle est décrite dans le paragraphe ci-dessous.

■ 5.3 Pourcentage d'erreur moyen en valeur absolue

Le pourcentage d'erreur moyen en valeur absolue, « *Mean Absolute Percentage of Error* » (MAPE), est une moyenne de déviation relative à la valeur de chaque mesure y_i . Il peut être exprimé en % de valeur de la variable y:

$$MAPE = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^{n} \left| \frac{y_{i, mes} - y_{i, est}}{y_{i, mes}} \right|$$

MAPE % = MAPE.100

équation 66 – Pourcentage d'erreur moyen en valeur absolue, MAPE.

Avec $\bar{\mathcal{Y}}$ la moyenne des y_i mesurés.

Le MAPE permet d'exprimer une erreur qui ne défavorise pas, pour un même échantillon, les mesures dont la valeur est faible par rapport à celle dont la valeur est forte. Cela peut être intéressant pour les cinétiques de dégradation, dont les valeurs initiales sont souvent bien plus élevées que les valeurs finales.

5.4 Estimation des erreurs par validation croisée

Il existe plusieurs méthodes permettant d'évaluer la qualité (ou l'erreur) de prédiction d'une fonction de régression. Pour comprendre ces méthodes il faut distinguer ce que l'on appelle l'**échantillon de calibration** de la régression (c'est-à-dire les observations qui ont servi à calculer les paramètres de la régression), de l'**échantillon de validation** de la régression (c'est à dire les observations qui servent à évaluer la qualité de la prédiction).

Estimation de l'erreur avec les données de calibration du modèle ou avec des données indépendantes

Les méthodes les plus simples utilisent les mêmes observations pour calibrer et pour évaluer la régression. Calibration et régression ne sont pas indépendantes, ce qui réduit fortement la puissance de ces tests. L'équation 61, p. 288, donne deux estimations simples du biais et de l'erreur.

A l'autre extrême, on peut disposer de deux jeux d'observations indépendants, un pour la calibration du modèle, et un autre pour sa validation. Les deux jeux d'observations peuvent être issu d'un même jeu de données initial, séparé – préalablement et aléatoirement – en deux parties. Cette approche garantit une bonne indépendance des résultats de calibration et des résultats de validation, mais elle ne met pas à l'abri d'un tirage aléatoire donnant deux jeux de données 'contrastées' et aboutissant à une erreur plus faible ou plus forte que pour un tirage aléatoire donnant deux jeux de données similaires. Les fonctions utilisées pour estimer le biais ou l'erreur sont les mêmes que précédemment, celles utilisées dans le calcul étant simplement différentes de celles utilisées pour calibrer la régression.

■ Validation croisée '*leave-one-out*' ou '*leave-some-out*'

Il existe des méthodes intermédiaires, se basant sur des échantillons de calibration et de validation séparés aléatoirement et indépendants, mais avec plusieurs répétitions de l'opération. L'estimation de l'erreur est alors réalisée sur la moyenne des résultats des opérations répétées, ce qui garantit une meilleure répétabilité des estimations. La méthode utilisée ici est une variante de la 'validation croisée'. La validation croisée consiste à diviser le jeu de n observations initiales en k groupes de taille approchant n/k. La répartition des observations dans les k groupes est effectuée par tirage aléatoire. On calcule ensuite k régressions successives, avec pour jeu de calibration les n observations initiales, moins les observations du groupe k. Les observations du groupe k servent à calculer l'erreur de la k^e régression, ce qui constitue une estimation indépendante. On obtient ainsi k estimations de l'erreur de régression, dont on prend la valeur moyenne comme estimation de l'erreur de la régression globale. Cette dernière est calculée en utilisant cette fois le jeu complet des n observations. On voit que l'erreur est estimée sur des régressions différentes de la régression finale, mais élaborées avec une sous-partie du jeu de données. Elle est donc supposée proche de l'erreur de prédiction réelle de la régression finale. Cette méthode est appelée validation croisée (cross-validation) *'leave-some-out*.

La variante de la validation croisée (cross validation) utilisée est appelée 'leave-one-out' (abrégée 'CV-LOO') car le nombre de sous-groupes k est égal à n. C'est donc une seule observation qui est mise de côté à chacune des n étapes du calcul de l'erreur. Cette variante présente quelques limitations sur le plan statistique (Wold *et al.*, 2001, p. 116), mais elle a l'avantage considérable de donner un résultat exactement identique pour un même jeu de données, ce qui est très important pour les étapes décrites dans les paragraphes suivants (choix du nombre de composantes et sélection des variables). Il est en effet important d'obtenir un résultat 'stable', qui ne change pas d'un essai l'autre.

Une alternative à la méthode CV-LOO décrite ci-dessus pourrait être l'augmentation du nombre de répétitions des opérations de cross-validation (répéter les calculs z fois, avec, chaque fois, un découpage aléatoire en k groupes de taille homogène). Les techniques de *bootstrap* sont une alternative et une généralisation de la méthode de cross-validation. Il s'agit dans ce cas de répéter z fois une opération de tirage aléatoire séparant les n données initiales en 2 groupes calibration/validation dont la taille est déterminée à l'avance (si n est faible, il est préférable d'avoir un échantillon de validation de petite taille par rapport à l'échantillon de validation. Ces approches présentent cependant plusieurs inconvénients : il est nécessaire de tester au préalable le nombre de répétitions z nécessaires pour avoir une estimation de l'erreur ne variant pas trop d'un essai à un autre (stabilité de l'estimation) ; comme z est souvent élevé (>> 100 dans notre cas), les temps de calculs peuvent être élevés. C'est pour cette raison que ces méthodes n'ont pas été utilisées avec la PLSR ou avec les autres méthodes de prédiction.

6 Transformations de variables : quelques exemples

■ 6.1 Centrage et réduction d'une variable

Le centrage d'une variable consiste à lui retrancher sa valeur moyenne. La valeur moyenne de la variable est alors égale à zéro. La réduction d'une variable, aussi appelée mise à l'échelle, consiste à la diviser par son écart type. L'écart type de la variable devient est alors égal à un. Si l'on applique les deux transformations, on obtient une variable centrée réduite (équation 67).

Il ne s'agit pas d'une normalisation puisque cela ne corrige nullement l'asymétrie de la distribution. Il s'agit plutôt d'une 'standardisation' des valeurs et de leur variabilité.

J. Moeys | Annexes
$$x_{C,R} = \frac{x - \bar{x}}{\sigma_x}$$

équation 67 – Centrage et réduction d'une variable.

Avec $x_{C,R}$ la variable x centrée et réduite ; \overline{X} la moyenne de x et σ_x l'écart type de x.

■ 6.2 Transformation inverse négative

La transformation inverse négative d'une variable consiste à prendre sa valeur inverse (1/x). Appliquée seule, cette transformation a quelques inconvénients. Le résultat de la transformation est multiplié par -1 afin de garder l'ordre des valeurs initiales. La transformation inverse ne supporte pas de valeurs nulles. De plus, la fonction inverse est fortement discontinue au voisinage de x = 0 (positif ou négatif). Afin de palier à ces inconvénients, on ajoute à la variable x la valeur maximale de ces valeurs absolues, multipliée par un faible coefficient (fixé ici à 1,001). Cela garantit que toutes les valeurs transformées seront strictement positives. L'équation 68 décrit l'ensemble de la transformation :

$$x_T = \frac{-1}{x + max(|x|) \cdot 1,001}$$

équation 68 – Transformation inverse négative d'une variable.

Avec x_T la variable x transformée ; max(|x|) la valeur maximale de la valeur absolue de x.

Il est aussi possible de soustraite le maximum de la valeur absolue de x, au lieu de l'additionner. Cela peut, dans certains cas, 'normaliser' une variable plus efficacement que la transformation ci-dessus (cas du limon fin non décarbonaté par exemple).

■ 6.3 Transformation logarithmique

La transformation logarithmique décimale d'une variable consiste à prendre le logarithme de base 10 de la variable, après une translation de celle-ci sur des valeurs strictement positives (comme dans le cas précédent).

$$x_T = \log_{10}(x + max(|x|), 1,001)$$

 $\begin{array}{c} \acute{equation 69} - \text{Transformation logarithmique décimale d'une variable.} \\ \quad \text{Avec } x_T \text{ la variable x transformée.} \end{array}$

7 Choix du nombre de composantes et de variables pour la PLSR

Méthode de sélection du nombre de composantes

A moins de limiter arbitrairement le nombre de composantes calculées par la fonction PLSR utilisée, cette dernière calcule automatiquement n-2 composantes (n étant le nombre d'observations utilisées pour le calcul). A chaque composante la fonction associe une erreur croisée. L'erreur croisée de la composante u correspond en fait à l'erreur croisée d'une prédiction utilisant les valeurs cumulées des coefficients des composantes 1 à u. Le nombre de 'composantes cumulées' présentant la plus

faible validation croisée est considéré comme le nombre de composantes optimal. Ce sont les coefficients cumulés correspondant à ce nombre de composantes qui sont utilisés comme résultat de la PLSR.

Méthodes de sélection des variables prédictives

Deux méthodes de sélection ont été utilisées. Elles sont basées sur le même principe de sélection de variables, mais leur mode de fonctionnement diffère.

□ *Méthode de sélection 'backward'*

La première, intitulée ici **sélection** '**backward**' (en marche arrière), consiste à partir du jeu complet de variables prédictives et à **éliminer les variables une par une**, en évaluant à chaque étape, et de manière systématique, la variable la plus intéressante à supprimer.

À une étape donnée, le critère permettant de choisir la variable la plus intéressante à supprimer est l'erreur croisée de prédiction (méthode *Leave-One-Out*, LOO). La procédure exacte de choix est exposée ci-dessous. Soit un jeu de n variables prédictives initiales parmi lesquelles le choix doit être effectué $(x_1, x_2, x_3, ..., x_n)$:

- A une étape donnée (l'étape k), on dispose d'un jeu de i (i ≤ n) variables prédictives restantes (x₁, x₂, x₃, ..., x_i) pour prédire la valeur de la variable y. Ce jeu de i variables est appelé jeu de variables initial de l'étape.
- L'opération va consister à calculer i PLSR avec, pour chacune, un jeu de données ne différant du jeu initial de l'étape que par une variable (en moins).
- La PLSR n⁹ est réalisée en prenant le jeu de variables prédictives complet moins la variable explicative x₁ (x₂, x₃, ..., x_i) ; la PLSR n² est réalisée en prenant le jeu de variables prédictives complet moins la variable explicative x₂ (x₁, x₃, ..., x_i) ... et ainsi jusqu'à la i^e PLSR. Le nombre de composantes 'optimal' de chacune des PLSR calculées est choisi en suivant la procédure décrite plus haut, basée sur l'erreur croisée de prédiction.
- Pour chacune des i PLSR, l'erreur croisée de prédiction a été calculée.
- La PLSR présentant l'erreur croisée de prédiction minimale correspond à la variable qu'il faut éliminer. Ainsi, si la PLSR n⁴ a l'erreur croisée de prédiction la plus faibl e, cela signifie que la variable x₄ est la variable à éliminer à cette étape, puisque sa 'non-utilisation' dans la PLSR n⁴ a permis d'obtenir la plus faible erreur crois ée des i PLSR testées.
- L'erreur croisée de la PLSR n⁴ devient, par la même occasion, l'erreur croisé e attribuée à l'étape k. Cette valeur sera utilisée au moment de comparer les différentes étapes de la sélection, afin de déterminer celle qui a permis d'aboutir à l'erreur croisée la plus faible. De même, le jeu de données 'final' (dans notre exemple : x₁, x₂, x₃, x₅, ..., x_i) de l'étape est aussi associé à l'étape.

Dans un premier temps la procédure *backward* est réalisée jusqu'au bout, c'est-àdire qu'elle n'est interrompue que quand il ne reste plus qu'un nombre limité de variables de prédiction (2 variables étant le nombre choisi arbitrairement pour cette étude). On a donc un nombre d'étapes k égal à (n-2).

Dans un second temps, chacune des k étapes (suppression de variables) de la procédure est examinée, afin de déterminer à quelle étape l'erreur de prédiction était minimale. Le jeu de variables prédictives final de l'étape retenue, et la PLSR correspondante, correspondent à la meilleure prédiction obtenue (qui n'est pas forcément la meilleure PLSR pouvant être obtenue).

Le nombre d'étapes de calcul de cette procédure pouvant être assez considérable (pour 15 variables, 117 calculs de PLSR sont nécessaires), elle a été entièrement écrite sous forme d'un script en langage R permettant d'exécuter toute la procédure 'en bloc'. La fonction de calcul de PLSR du logiciel R n'inclut malheureusement pas de procédure de sélection de variables, contrairement à son concurrent commercial SAS.

L'inconvénient de cette méthode est sa relative lenteur (du fait du nombre de calculs). L'avantage de cette méthode est qu'elle ne nécessite pas de choisir 'arbitrairement' une variable de départ, contrairement à la deuxième méthode exposée ci-dessous. Les limitations communes aux deux méthodes sont exposées plus loin.

□ *Méthode de sélection 'forward'*

La seconde méthode, intitulée ici **sélection** '*forward*' (en marche avant) consiste, en partant d'une variable initiale jugée pertinente par l'opérateur, à ajouter les variables une par une, en évaluant à chaque étape, et de manière systématique, la variable la plus intéressante à ajouter.

À une étape donnée, le critère permettant de choisir la variable la plus intéressante à ajouter est – comme pour la méthode *backward* – l'erreur croisée de prédiction (méthode *Leave-One-Out*). La procédure exacte de choix est exposée ci-dessus. Soit un jeu de n variables prédictives initiales parmi lesquelles le choix doit être effectué (x_2 , x_3 , ..., x_n ; la 1^{ère} variable, x_1 , étant la variable imposée) :

- A la première étape, on dispose de la variable initiale imposée, x₁, et du reste des variables explicatives, parmi lesquelles il faut en sélectionner une à ajouter à la variable initiale pour le calcul de la PLSR. Plus généralement, à une étape donnée (l'étape k), on dispose d'un jeu de i=k variables prédictives initiales résultant des sélections précédentes (x₁, x₂, x₃, ..., x_i) pour prédire la valeur de la variable y.
- L'opération va consister à calculer j PLSR (j=n-k) avec, pour chacune, un jeu de données ne différant du jeu initial de l'étape que par une variable (en plus).
- La PLSR n^q est réalisée en prenant le jeu de variables prédictives initial de l'étape plus la variable explicative x_{i+1} (x₁, x₂, x₃, ..., x_i, x_{i+1}); la PLSR n^q est réalisée en prenant le jeu de variables prédictives initial plus la variable explicative x_{i+2} (x₁, x₂, x₃, ..., x_i, x_{i+2}) ... et ainsi jusqu'à la j^e et dernière PLSR (x_j). Le nombre de composantes 'optimal' de chacune de ces PLSR calculées est choisi en suivant la procédure décrite plus haut, basée sur l'erreur croisée de prédiction.
- Pour chacune des j PLSR, l'erreur croisée de prédiction a été calculée.
- La PLSR présentant l'erreur croisée de prédiction minimale correspond à la variable qu'il faut ajouter. Ainsi, si la PLSR n⁶ a l'erreur croisée de prédiction la plus faibl e, cela signifie que la variable x₆ est la variable à ajouter à cette étape, puisque son utilisation dans la PLSR n⁶ a permis d'obtenir la plus faible erreur crois ée des j PLSR testées.

L'erreur croisée de la PLSR n⁶ devient, par la même occasion, l'erreur croisée attribuée à l'étape k. Cette valeur sera utilisée au moment de comparer les différentes étapes de la sélection, afin de déterminer celle qui a permis d'aboutir à l'erreur croisée la plus faible. De même, le jeu de donnée 'final' ($x_1, x_2, x_3, ..., x_i, x_6$) de l'étape est aussi associé à l'étape.

Dans un premier temps, la procédure *forward* est réalisée jusqu'au nombre de variables explicatives sélectionnées choisi préalablement par l'opérateur (pour cette étude, la procédure a été limitée à 15 variables). Elle peut aussi être menée jusqu'au bout, c'est-à-dire quand les n variables initiales ont été ajoutée.

Limiter le nombre de variables ajoutées présente l'intérêt de limiter le nombre de

calculs à effectuer. Cela ne présente pas d'inconvénient dans la mesure où au-delà d'un certain nombre de variables, l'intérêt de la dernière variable ajoutée relativement au résultat obtenu précédemment est généralement faible (i.e. amélioration ou dégradation négligeable de la RMSEP). Inversement, réduire de manière trop importante le nombre maximal de variables explicatives à ajouter peut parfois poser problème. En effet, certaines variables n'ont une valeur explicative pour la variable d'intérêt que lorsqu'une autre variable explicative est inclue dans l'analyse. Ce n'est donc qu'une fois cette dernière variable inclue dans l'analyse que l'ajout de la première améliore significativement la prédiction croisée (cas d'interdépendance des variables explicatives). Dans l'étude présentée ici, ces cas étaient rares et présentaient peu d'intérêt.

Comme pour la méthode *backward*, le nombre d'étapes de calcul de cette procédure a conduit à formaliser la procédure sous forme d'un script en langage R permettant d'exécuter toute la procédure 'en bloc'.

L'inconvénient de cette méthode est l'importance cruciale de la variable initiale choisie. Ce point est éclairci dans le paragraphe suivant. L'avantage de cette méthode est sa relative rapidité, puisqu'elle peut être interrompue prématurément.

Choix de la variable explicative initiale avec la méthode forward

Avec la méthode de sélection *forward*, le choix de la variable initiale est très important. Il est donc nécessaire d'exposer la manière dont il a été effectué, d'autant que celui-ci se fait parfois en plusieurs étapes.

Dans un premier temps, la variable initiale choisie, x_1 , est la variable explicative la mieux corrélée à la variable d'intérêt (corrélation de Spearman). Ce choix effectué, une procédure de sélection *forward* est lancée sur un jeu de variables explicatives (incluant forcément la variable initiale x_1). Dans un deuxième temps, une procédure de sélection *backward* est effectuée sur le même jeu de variables explicatives.

Deux constats peuvent amener à réévaluer le choix de la variable initiale de la procédure *forward* :

- La RMSEP de la PLSR obtenue sur le jeu de données 'optimal' déterminé par la méthode *forward* est plus élevée que celle de la méthode *backward*.
- La dernière variable éliminée dans la procédure backward n'est pas la variable initiale choisie pour la procédure forward, ce qui signifie que, dans la procédure backward, la variable x₁ a été éliminée avant la fin, à l'avantage d'une autre variable dont l'élimination pénalisait plus le résultat de la PLSR (plus que l'élimination de x₁).

Si l'un ou l'autre de ces cas (généralement les deux) existe, une nouvelle procédure de sélection *forward* est lancée, avec, pour variable initiale, la variable qui n'a pas été éliminée lors de la sélection *backward* ou, alternativement, une autre variable bien corrélée à la variable d'intérêt.

□ Cas de résultats divergents entre les méthodes backward et forward

Il arrive que les deux procédures de sélection de variables donnent, pour un même jeu de variables explicatives et une même variable expliquée, des résultats différents (variables explicatives retenues). Il arrive aussi que se surajoute à ce problème le fait que les deux procédures donnent des erreurs de croisée de prédiction similaires, ce qui rend difficile le choix d'une méthode plutôt qu'une autre.

Ce problème vient à la fois des caractéristiques des variables utilisées que des différences de fonctionnement entre les méthodes. Les variables explicatives utilisées

J. Moeys Annexes

sont parfois corrélées. Elles sont même parfois très liées de part la manière dont elles ont été obtenues. Les fractions granulométriques non-décarbonatées et décarbonatées sont ainsi très similaires du fait de la faible quantité (ou de l'absence) de carbonates dans les échantillons. Les paramètres des fonctions de rétention en eau et de conductivité hydraulique de Campbell sont très liés aux variables dont elles sont dérivées : teneur en eau à saturation, à pF 2, à pF 4,2, conductivité hydraulique à - 1 cm...

Pour ces raisons, les variables corrélées & physiquement similaires ont une importance proche dans la PLSR. Or, lors de la procédure de sélection, le cortège de variables avec lesquelles sont mises en concurrence les variables 'liées' diffère d'une méthode à l'autre. Il en résulte des choix différents d'une procédure à l'autre. Dans le cas de la méthode *forward*, à une étape donnée, une variable est mise en concurrence avec des variables qui ne sont pas encore intégrées à la PLSR, et elle est utilisée avec des variables sélectionnées aux étapes précédentes. Dans le cas de la procédure *backward* une variable est mise en concurrence et utilisée avec des variables qui n'ont pas encore été éliminées de la PLSR. Il est donc probable que les étapes initiales de la sélection *backward* aboutissent à de mauvais ajustements et/ou une capacité de prédiction faible (erreur croisée élevée), du fait des nombreuses variables inutiles, pouvant engendrer l'élimination de variables 'pertinentes' (au regard de la sélection *forward*).

Un nombre important de variables explicatives au départ semble être un facteur aggravant ces problèmes. Cela aboutit en tout cas plus fréquemment à des résultats divergents entre les méthodes *forward* et *backward*. Pour cette raison, **plusieurs jeux de variables explicatives de départ, de taille plus limitée que la 50^{aine} de variables disponibles, ont été constitués**. Le paragraphe suivant expose la manière dont ils ont été constitués.

Constitution de sous-ensembles de variables prédictives à tester dans les analyses par PLSR

Du fait des limitations inhérentes aux procédures de sélection de variables mises en œuvre, il a été nécessaire de constituer des sous-ensembles de variables explicatives, préalablement choisis, sur lesquels ont été effectuées les procédures de sélection. Cela permet de limiter les différences de résultats entre les méthodes. Ces jeux de données sont basés sur un principe de cohérence (uniformité des méthodes de mesure) et de non-redondance de l'information (élimination des variables très liées). Les jeux de variables explicatives sont :

- (1) Les propriétés physico-chimiques de base, avec des fractions granulométriques non-décarbonatées, à savoir : la teneur en éléments grossiers totaux, les 3 fractions granulométriques non-décarbonatées (argile, limon, sable), le carbone organique, le pH, la teneur en CaCO₃, la masse volumique apparente, les teneurs en eau à saturation, pF 2 et pF 4,2 (11 variables) ;
- (1b) Ce jeu de variables explicatives est identique au précédent, mais le carbone organique y est remplacé par le ratio C/N. Ce jeu de données a été choisi spécifiquement pour la prédiction de la DT₅₀ de l'isoproturon.
- (2) Les propriétés physico-chimiques de base, avec des fractions granulométriques décarbonatées. Le jeu de données est identique au précédent, à l'exception des fractions granulométriques qui sont cette fois décarbonatées (11 variables);
- (3) Les propriétés physico-chimiques et pédologiques de base, avec une granulométrie non-décarbonatée. Il s'agit des mêmes variables que dans le jeu (1),

avec en plus la profondeur du sol et la teneur maximale en éléments grossiers calcaires du profil (13 variables).

La variabilité spatiale de la profondeur du sol et de la teneur maximale en éléments grossiers calcaires, et la subjectivité l'estimation de cette dernière expliquent la constitution de jeux de données séparés (3 et 4). Cela permet d'évaluer leur importance malgré le fait que les résultats de l'analyse risquent d'être plus relatifs que dans les cas 1 et 2.

- (4) Un jeu de variables explicatives supplémentaire a été constitué spécialement pour la prédiction de la demi-vie de l'isoproturon (en plus des autres ci-dessus). Il s'agit du même jeu que le jeu de variables explicatives (3), avec en plus la demi-vie de minéralisation, le K_D et le K_{OC} (soit 16 variables au total). Les 3 dernières variables sont en effet plus simples à acquérir que la mesure de la demi-vie de dégradation de l'isoproturon, d'où l'intérêt éventuel d'une prédiction basée sur ces variables (si elles sont pertinentes).

Histoire géologique et pédologique du site de Ouarville : synthèse et hypothèses

■ 8.1 Histoire géologique pré-glaciaire

Période géologique	Climat / Paysage	Phénomène			
Aquitanien	Lacustre	Dépôt du calcaire ^{NG} , sur le site :			
		- faciès gris sur les points hauts. ^{HY, NG} .			
		- faciès blanc crème. ^{HY, NG} .			
		- faciès rosé à meulières (talwegs). ^{HY, NG} .			
Burdigalien	Aride	Assèchement ^{NG}			
Burdigalien	Climat plus humide	Dépôts de graviers de Lozère ^{NG} = graviers			
		translucides quartzeux et rosés (de feldspaths			
		potassiques ?)			
Pliocène	Climat tiède et humide	Pénéplanation par l'érosion, donne le relief			
		actuel ^{NG}			
		- localement : mélange des graviers de			
		Lozère au calcaire.			
		 érosion plus accentuée sur les versants 			
		orientés au sud et à l'ouest. ^{HY}			
		- formation par fissuration et dissolution du			
		réseau karstique dans le calcaire. ^{na}			
		 en surface, apparition d'avens, voire de petites dolines. 			
		- dans les pentes, les dolines sont plus			
		caillouteuses, au moins en surface, du fait des apports locaux par érosion HY			
		- sur terrain plat et sous limon épais les			
		dolines sont non caillouteuses en surface			
		et avec plus d'argile de décarbonatation. HY			
Pliocène ?	?	Formation de l'argile à meulières HY, piégeage			
		dans les avens karstiques ^{HY}			
		- souvent : mélange avec les graviers de			
		Lozère ^{HY} .			
		- Y a-t-il (eu) des orientations de pentes plus			
		favorables à la formation de ces argiles à			
		meulières ??			

tableau 91 – Histoire géologique pré-glaciaire du site de Ouarville.

HY : hypothèse ; NG : information donnée par la notice de la carte géologique.

■ 8.2 Histoire géologique glaciaire

Période géologique	Climat / Paysage	Phénomène			
Glaciations IV ^{aires}	Froid	Gélifraction des 1 ^{ers} mètres du calcaire de Beauce. ^{NG}			
		 Formation d'un cailloutis calcaire en surface qui sera ensuite plus ou moins fortement altéré par la suite. ^{HY} Fractionnement important des cailloux de meulières, facilité par leur nature poreuse. ^{HY} 			
Glaciations IV ^{aires} ?	Froid	Cryoturbation			
		 La surface de contact entre calcaire, limon et argile à meulière devient irrégulière, voire ondulée. Très localement, apparition en surface de zones caillouteuses dans des secteurs plutôt plats et avec un limon plutôt épais. HY 			
Glaciations IV ^{aires} ?	Froid	Solifluxion ?			
IV ^{aires} ; Pléistocène ; Würm	Steppique ?	 Localement, en conditions de saturation en eau et de dégel, déplacement en masse des formations argileuses ou du cailloutis calcaire ?^{HY} Dépôt éolien de limon des plateaux ^{NG} Faiblement carbonaté ?^{HY} Au début / à la base, mélange du limon avec l'argile sous-jacente, par le gel ? Par l'érosion superficielle ? Par bioturbation ? HY 			
		 Par endroits, mélange avec des cailloux de calcaire et/ou de meulières, par l'érosion superficielle ?^{HY} Par endroits, l'érosion puis le dépôt de limon dans les fonds de talweg donne des limons rougeêtres ou grisêtres. 			
?	?	Formation d'argile de décarbonatation sous le limon et l'argile à meulières, surtout dans les avens karstiques. ^{HY}			

tableau 92 – Histoire géologique du site de Ouarville de la période glaciaire à fin du quaternaire.

HY : hypothèse ; NG : information donnée par la notice de la carte géologique.

■ 8.3 Pédogenèse récente et facteurs anthropiques

Pédogenèse

Depuis approximativement 10 000 ans (IV^{aire}, néogène, holocène), les matériaux géologiques présents en surface n'ont pas subi de remaniements profonds comme pendant les périodes glaciaires et périglaciaires. Les processus pédogénétiques ont progressivement altéré et structuré les matériaux géologiques meubles de surface.

- Décalcification de la couverture limoneuse, sauf en cas de présence d'éléments grossiers calcaires.^{HY}
- Brunification et structuration de la couverture limoneuse. HY
- Structuration des horizons argileux de décarbonatation ou à meulières. HY

- *localement* : **lessivage des argiles** (apparition d'horizons E) et accumulation (formation d'horizons BT).
- *localement*: phénomènes d'hydromorphie temporaires sur les horizons BT, d'argile à meulières ou d'argile de décarbonatation.- Taches rouilles (rares, dans Argile lourde).- Concrétions ferro-manganiques et enrobage des graviers de Lozère.- Traînées sombres dans les couches d'argile lourde.

■ Mise en culture des terres

Depuis environ 2000 ans, avec le climat tempéré favorable, les sols ont progressivement été **mis en culture** par l'homme, ce qui a contribué à un remodelage discret mais réel de la couche de surface des sols :

- Le travail du sol de plus en plus profond tend à homogénéiser les 30 à 40 premiers centimètres du sol.
- Pour les sols de limon moyen, pertes en matières organiques, engendrant ou accentuant des phénomènes de battance, puis de ruissellement par saturation, avec pour conséquence une érosion de surface. Les particules arrachées se déposent en bas des pentes, ou un peu plus loin ^{HY}, ce qui engendre :
 - une accentuation des accumulations de fractions limoneuses en bas des pentes les plus importantes.
 - très localement, des accumulations de fractions fines en surface des avens non caillouteux (la surface devient plus claire et plus battante).

Voire par exemple Govers et al. (1994) ou De Alba et al. (2004).

- Amendements calcaires en surface à partir de carrières locales, induisant :
 - une **re-carbonatation** locale et temporaire de l'horizon de surface.^{HY}
 - un apport plus pérenne de graviers de Lozère (avec le calcaire) sur l'horizon de surface. Le calcaire fini par être dissout dans l'horizon de surface, mais les graviers de Lozère, siliceux, restent.^{HY}
- Disparition progressive des zones boisées, jusqu'à ne maintenir que quelques bois épars. ^{HY}

L'anthropisation se manifeste aussi par le tracé de routes et de chemins, la plantation de haies et le marquage des limites de parcelles, par :

- apport de cailloux de calcaires et de meulières, de provenance locale, pour stabiliser les chemins.^{HY}
- alimentation en cailloux par épierrement des champs, et dépôt sur les bords de parcelles. S'ajoute aujourd'hui l'épierrage par les chantiers de récolte de pomme de terre.^{HY}
- en période estivale de récolte des céréales, transport par le vent de particules fines.^{HY}
- re-dépôt de ces particules dans les zones enherbées : bords de parcelle, haies, chemins. $^{\rm HY}$

La **conséquence globale** de ces 'linéaires' de communication et de démarcation est un **épaississement par accumulation des bords de parcelle, haies, chemins**, créant ainsi des reliefs aussi important que la microtopographie locale.^{HY}

Au XX^e siècle, après la 2e guerre mondiale, **deux remembrements successifs**, en

1958 puis en 1992 ont accompagné ou induit :

- la disparition progressive de l'élevage (s'il existait encore ?) et des prairies qui y étaient associées ;
- un agrandissement conséquent des parcelles ;
- la suppression de chemins intercommunaux, suppression ou déplacement de chemins inter-parcelles, de haies et de limites de parcelles.

On retrouve, à l'heure actuelle, en lieu et place des anciens chemins, une microtopographie d'origine anthropique, qui marque souvent des sols encore 'perturbés' par l'anthropisation (tassements, charge en éléments grossiers).^{HY}



Typologie des variables des modèles de transfert



figure 96 – Les différents types de variables utilisées par les modèles informatiques de transferts de pesticides.

Inspiré du schéma conceptuel et du glossaire des Good Modelling Practice (STOWA-RIZA, 1999).

10 Fiche des sondages tarière

Etude : 79	TNDA FCCG O	Coordonné	es (Lamb 1 metres		
	a.	¥ -	Y = V = V = V		
- In du sondag	e).	7-	!	·· <u>2</u> 0	
Lieu dit / Commu	9). Ine :	Date :	/ / 200	-	
		Date .	/ / 200_)
plateau 1/3	^{i>} □1/2 _			60	
	1/3 < □ bas		_ Sigle :	E	
		alwed	M1 M2 Pr	<u>ту Ну ₈₀</u>	
		anog			
				15 % <u>1</u> 00	C
] — Pe	nte:%	6	05 %	
				120)
Description de la	parcelle et son état de s	urface :			
culture en plac	e :	🖵 drainage	traces : 🛛 ér	rosion, 🛛 batta	nce
stade de crois	sance :	🗆 pierres :	%, nature :	🗆 = app	port
précédent cult	ural :	Autres indic	æs et données (rég. l	hyd. etc.) :	
prairie : 🛛 🛛 per	ma. 🛛 🗋 temp.				
-					
	coul. clar.	EG1 natr.	qtité	% tail. grox	c pr bl
1 txt.	humidt. 0 1 2 3 4	" 2 ""	50 B	% " " "	
1 🔲 calc	HCI 01234	<u> </u>) II II	% " "	
1 type	oxy atité 0 1 2 3 4 5 6 c	ontr. 1 2 3	concrt° qtité 0123	4 5 6 natr.	
1 n°bte	red				
<u>Elim.</u> cm	coul. clar.	🖻 EG1 natr.	qtité	% tail. grox	∢prbl∣
2 txt.	humidt. <u>21234</u>	" 2 ""		% " " "	
2 🔲 calc	HCI 01234	" 3 ""		% " " "	" "
2 type	OXY atité 0 1 2 3 4 5 6 c	ontr 1 2 3	concrt° qtité 0_1_2-3-	4 5 6 natr.	
2 n°bte	red 446 0 1 2 3 4 5 0 6				
lim. cm	coul. clar.	🖻 EG1 natr.	qtité	% tail. grox	c pr bl
3 txt.	humidt. 01234	" 2 ""		% " " "	""
3 🔲 calc	HCI 01234	" 3 ""		% " " "	" "
3 type	oxy atité o 1 2 2 4 5 0 5		concrt° qtité <u>0123</u>	4 5 6 natr.	
3 n°bte	red 11213141310 0	onu. 1 2 3			
Elim. cm	coul. clar. 012	EG1 natr.	qtité	% tail. grcx	(prbl
4 txt.	humidt. 01234	" 2 ""		% " " "	" "
4 🗆 calc	HCI 01234	" 3 ""		% " " "	" "
4 type	oxy		concrt° qtité 0123	4 5 6 natr.	
4 n°bte	red quite 0 1 2 3 4 5 6 c	ontr. 1 2 3	9740970979-0069149 - 2421-0026059 - 2008-46645		
lim. cm/	coul. clar. 012	EG1 natr.	qtité	% tail. gr cx	c pr bl
5 txt.	humidt. 01234	" 2 ""	ан н 1	% " " "	
5 🔲 calc	HCI 01234	" 3 ""		% " " "	
5 type	оху	1.11	concrt° qtité 0123	4 5 6 natr.	
5 n°bte	red qtite 0 1 2 3 4 5 6 c	ontr. 1 2 3	A. PESIAL		
Elim. cm/					
·	Raison arrêt : 🔲 obsta	cle 🔲 fond de	tarière 120 cm	carte géol. :	
ROCHE /	Nom génét. du sol RP :	C	PCS	format°:	
OBSTACLE	Notes :				-
prof. cm.					
Nature :					
	_				
Version 1.03 - février 200	- 6 INA-PG/INRA Grignon (Chambre d	'Agriculture de la Sor	nme)	FICHE CA80 20	006.xls

figure 97 – Fiche de sondage tarière utilisée pour décrire les sondages.

Version modifiée et adaptée de la fiche de la Chambre d'Agriculture de la Somme (2003).

11 Cartes des propriétés quantitatives mesurées

11.1 Propriétés pédologiques et physicochimiques



figure 98 – Carte de la profondeur du sol et de la teneur en argile de l'horizon de surface sur 34 sites (50 couches) étudiés.

La taille des cercles est proportionnelle à la valeur de la propriété ; quand deux cercles concentriques sont représentés, il s'agit de deux couches mesurées sur un même site : le lit de semence et le reste de l'horizon travaillé ; les croix obliques indiquent la localisation précise des sites, tandis que le quadrillage régulier de croix droites reprend les coordonnées Lambert 1 carto indiquées par les axes de latitude et de longitude. La topographie, les routes et les forêts sont représentées en trame de fond.





surface sur 34 sites (50 couches) étudiés.





11.2 Propriétés hydrologiques



Légende : voir la figure 98; l'<u>échelle</u> des K_{SAT}. est transformée en log₁₀.



A - Fraction d'eau immobile



Légende : voir la figure 98.















- **figure 103** Carte des valeurs de coefficient d'adsorption normalisé par la fraction de carbone organique et de temps de demi-vie de l'isoproturon de l'horizon de surface sur 34 sites (50 couches) étudiés.
 - Légende : voir la figure 98.

Abstract

<u>Keywords:</u> Soil; herbicide; isoproturon; spatial variability; determinisms; adsorption; degradation; hydraulic properties; immobile water fraction.

Diffuse pollution of groundwater bodies by pesticides is a critical environmental issue. Approaches designed to spatially modulate the applied pesticide dose, as a function of pesticide leaching risks down the soil, seem to be appealing solutions. In a research context, such approaches require a mapping of soil hydropedologic properties and of pesticides adsorption and degradation properties, in order to be able to model molecules fate in soils. The PhD work presented here deals with the first step of such approach: the characterisation of soils properties and an herbicide molecule - isoproturon - fate properties in soil at the scale of a 2600 ha agricultural area in the Beauce chartraine region.

The PhD **objectives** hold in 3 parts: [i] characterising the spatial variability of soils pedological, physico-chemical and hydraulic properties (water retention, hydraulic conductivity K_{SAT} , immobile water fraction f_{IMM}), as well as isoproturon adsorption (K_D) and degradation (DT_{50}) properties in the topsoil of the studied area; [ii] Identify the agronomical and/or pedological determinisms of properties that are important for pesticides fate in soils; [iii] Calibrate and test **pedotransfer classes or functions** in order to predict important properties using simpler agronomical and/or pedological properties.

Soils in the studied area have intermediate thickness and are derived from an aeolian loess that stands on a frost cracked and cryoturbed limestone. The topsoil of 34 sites has been characterised, with a systematic measurement of the seedbed properties, and a partial measurement of the rest of the cultivated layer. Among the 50 layers / samples that were characterised, one-third holds in no-tillage fields. With the exception of bulk density, **soil physico-chemical properties are moderately variable** (notably clay and CaCO₃ contents). If the water holding properties and isoproturon K_D are moderately contrasted too, soil f_{IMM} , and K_{SAT} , as well as isoproturon DT_{50} are highly variable. An important 'method effect' has been identified when treating the measurements results of these two last variables. A 'robust' direct fitting procedure has been applied for DT_{50} estimation. This last method does not solve the critical lack of correspondence between a degradation kinetics that was indeed biphasic and the first order equation used by pesticide fate models.

A close look at the statistical relations that exist between variables with both parametric and non-parametric methods revealed coherent but weak links (and thus potentially determinisms) between the variables: an important part of the spatial variability is not explained by the measured agro-pedological variables. The impossibility of calibrating local classes or pedotransfer functions with a satisfying prediction error arises as a logic, but problematic, consequence of this 'undetermined' variability of soils and isoproturon fate variability. It is only possible to consider a K_D or K_{OC} prediction. It does not seems to be possible to predict – and so to spatialize – the other important properties influencing isoproturon fate in the topsoil of the studied area, using the measured properties together with the statistical analysis tested.

A Résumé

<u>Mots clé :</u> Sol ; herbicide ; isoproturon ; variabilité spatiale ; déterminismes ; adsorption ; dégradation ; propriétés hydriques ; fraction d'eau immobile.

La pollution diffuse des nappes phréatiques par les pesticides pose un problème environnemental critique. Les approches visant à moduler spatialement la dose de pesticide apportée en fonction des risques de transfert des molécules phytosanitaires à travers le sol sont *a priori* une solution séduisante. Dans un cadre de recherche, ces approches requièrent une connaissance spatialisée des caractéristiques hydropédologiques du sol, de l'adsorption et de la dégradation des molécules phytosanitaires, afin de pouvoir modéliser le comportement des molécules. Le travail de thèse présenté ici porte sur la première étape d'une telle démarche, la caractérisation des propriétés du sol et d'une molécule herbicide – l'isoproturon – à l'échelle d'un secteur agricole de 2600 ha de Beauce chartraine.

Les **objectifs** de la thèse se décomposent en 3 parties : [i] Caractériser la variabilité spatiale des propriétés pédologiques, physico-chimiques et hydriques du sol (rétention en eau, conductivité hydraulique K_{SAT} , fraction d'eau immobile f_{IMM}), ainsi que les propriétés d'adsorption (K_D) et de dégradation (DT_{50}) de l'isoproturon dans l'horizon de surface du secteur agricole étudié ; [iii] Identifier les déterminismes agronomiques et/ou pédologiques des propriétés importantes pour le comportement des pesticides dans les sols ; [iv] Établir et tester des **classes et des fonctions de pédotransfert** permettant de prédire ces propriétés déterminantes à partir de propriétés agronomiques ou pédologiques plus simples.

Les sols de ce secteur sont des sols moyennement épais développés dans un limon éolien reposant sur un calcaire gélifracté et cryoturbé. L'horizon de surface de 34 sites a été caractérisé, avec une détermination systématique des propriétés du lit de semence, et une détermination partielle du reste de l'horizon travaillé. Sur les 50 couches / échantillons de sol caractérisés, un tiers se trouvent dans des parcelles en travail simplifié (sans labour). À l'exception de la masse volumique apparente, les propriétés physico-chimiques du sol sont peu variables (teneur en argile et en CaCO₃ notamment). Si les propriétés de rétention en eau et le K_D de l'isoproturon sont, elles aussi, modérément contrastées, la f_{IMM}, la K_{SAT}, et la DT₅₀ de l'isoproturon sont très variables. Un 'effet méthode' conséquent a été identifié pour l'interprétation des résultats des mesures de ces deux dernières propriétés. Une procédure d'ajustement direct 'robuste' des données d'infiltration a été mise au point pour calculer le K_{SAT}, ainsi qu'une procédure d'ajustement direct des données de dégradation pour le calcul de la DT₅₀ de l'isoproturon, mais elle ne résout pas l'inadéquation critique entre la cinétique de dégradation 'effectivement' biphasique observée pour la molécule et le modèle d'ordre 1 utilisé par les modèles pesticides. Une étude attentive des liens statistiques entre les propriétés par des méthodes paramétriques et non-paramétriques révèle des liens (et donc des déterminismes potentiels) cohérents mais peu marqués entre les propriétés : une part importante de la variabilité spatiale n'est pas expliquée par les propriétés agro-pédologiques mesurées. La conséquence logique, mais problématique, de cette variabilité 'indéterminée' des propriétés du sol et de l'isoproturon est l'impossibilité d'établir des classes ou des fonctions de pédotransfert locales avec une erreur de prédiction satisfaisante. Seule la prédiction du K_D, ou du K_{OC}, peut être envisagée. Avec les propriétés mesurées et les méthodes d'analyse testées, il ne semble pas possible de prédire - et donc de spatialiser - les autres propriétés importantes pour le devenir de l'isoproturon dans l'horizon de surface de ce secteur.